Amplitude de diffusion

Exemple 1 du cours

$$\hat{H}_{\text{int}} = \int \mathrm{d}^3 r\, U(\hat{\vec{R}} - \vec{r})\,\hat{\rho}_I(\vec{r})$$

Considérons un processus de diffusion au cours duquel :

- la particule sonde passe d'un état initial d'impulsion $\hbar\vec{k}_i$ et d'énergie ε_i à un état final d'impulsion $\hbar\vec{k}_f$ et d'énergie ε_f.
- le système de N bosons passe d'un état initial ψ_i, d'énergie E_i à un état final ψ_f, d'énergie E_f.

L'amplitude diffusion fait intervenir l'élément de matrice :

$$\left\langle \vec{k}_f, \psi_f \middle| \hat{H}_{\text{int}} \middle| \vec{k}_i, \psi_i \right\rangle$$

Exemple 1 (suite)

Transformée de Fourier de U :

$$\mathcal{U}_{\vec{k}} = \int \mathrm{d}^3 r \; e^{i\vec{k}.\vec{r}} \, U(\vec{r})$$

En utilisant : $\hat{\rho}_I(\vec{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}.\vec{r}} \; \hat{\rho}_{\vec{q}}$

on peut réécrire $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ sous la forme :

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \int \mathrm{d}^3 r \; U(\hat{\vec{R}} - \vec{r}) \, \hat{\rho}_I(\vec{r})$$

$$= \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}.\hat{\vec{R}}} \hat{\rho}_{\vec{q}} \frac{1}{L^3} \int \mathrm{d}^3 r \, e^{-i\vec{q}.(\vec{r}-\hat{\vec{R}})} U(\vec{r})$$

$$= \sum_{\vec{q}} \frac{1}{L^3} \mathcal{U}_{\vec{q}} \, e^{-i\vec{q}.\hat{\vec{R}}} \; \hat{\rho}_{\vec{q}}$$

Dans l'élément de matrice de $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ apparaît :

$$\left\langle \vec{k}_f \middle| e^{-i\vec{q}.\hat{\vec{R}}} \middle| \vec{k}_i \right\rangle = \delta_{\vec{q}, \vec{k}_i - \vec{k}_f}$$

Finalement , pour l'exemple 1,l'élément de matrice de $\hat{H}_{\text{int}}$ s'écrit :

$$\left\langle \vec{k}_f, \psi_f \left| \hat{H}_{\text{int}} \right| \vec{k}_i, \psi_i \right\rangle = \frac{1}{L^3} \mathcal{U}_{\vec{q}} \left\langle \psi_f \left| \hat{\rho}_{\vec{q}} \right| \psi_i \right\rangle$$

avec $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$

Taux de transition (règle d'or de Fermi)

$$w = \frac{2\pi}{\hbar L^6} \left| \mathcal{U}_{\vec{q}} \right|^2 \left| \left\langle \psi_f \left| \hat{\rho}_{\vec{q}} \right| \psi_i \right\rangle \right|^2 \delta\left(E_f - E_i - \hbar\omega \right)$$

avec :

$$\vec{q} = k_i - \vec{k}_f \qquad \hbar\omega = \varepsilon_i - \varepsilon_f$$

Si l'on ne détermine pas l'état final du système de bosons, il faut sommer sur *f* :

$$w = \frac{2\pi}{\hbar L^6} \sum_f \left| \mathcal{U}_{\vec{q}} \right|^2 \left| \left\langle \psi_f \left| \hat{\rho}_{\vec{q}} \right| \psi_i \right\rangle \right|^2 \delta\left(E_f - E_i - \hbar\omega \right)$$

Exemple 2

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{\hbar\omega_R}{2}\left[\hat{\rho}_{\vec{q}}\, e^{-i\omega t} + \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\, e^{+i\omega t}\right]$$

Processus Raman stimulé correspondant à l'absorption d'un photon $\vec{k}_1, \omega_1$ et à l'émission stimulée d'un photon $\vec{k}_2, \omega_2$, le système de N bosons passant d'un état initial ψ_i, d'énergie E_i à un état final ψ_f, d'énergie E_f.

$$\left\langle \vec{k}_2, \omega_2; \psi_f \middle| \hat{H}_{\text{int}} \middle| \vec{k}_1, \omega_1; \psi_i \right\rangle = \frac{\hbar\omega_R e^{-i\omega t}}{2} \left\langle \psi_f \middle| \hat{\rho}_{\vec{q}} \middle| \psi_i \right\rangle$$

Taux de transition :

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \times$$

$$\sum_f (\hbar\omega_R/2)^2 \left| \left\langle \psi_f \middle| \hat{\rho}_{\vec{q}} \middle| \psi_i \right\rangle \right|^2 \delta\left(E_f - E_i - \hbar\omega\right)$$

avec : $\vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$, $\hbar\omega = \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2$

Recapitulation : structure de l'amplitude de transition.

Produit de deux termes

Le premier terme ($\mathcal{U}_{\vec{q}}$ pour l'exemple 1, $\hbar\omega_R / 2$ pour l'exemple 2) ne dépend que du potentiel d'interaction de la particule sonde avec un atome cible.

Il serait le même pour la diffusion de la particule sonde par un seul atome cible et apparaît donc dans la section efficace de diffusion d'un seul atome cible.

Le second terme, $\left\langle \psi_f \middle| \hat{\rho}_{\vec{q}} \middle| \psi_i \right\rangle$, dépend des états initial et final du système de *N* bosons. Il décrit l'effet des interférences entre les diffusions des différents atomes de la cible.

Lien avec l'expérience

On mesure la perte d'impulsion $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}_i - \vec{k}_f)$ et la perte d'énergie $\hbar\omega = \varepsilon_i - \varepsilon_f$ de la particule sonde.

On connaît donc $\vec{q}$ et ω.

On connaît par ailleurs la section efficace de diffusion par une seule particule cible.

On connaît donc $\mathcal{U}_{\vec{q}}$ ou $\hbar\omega_R / 2$.

La mesure du taux de diffusion par le système de bosons permet donc de déterminer une grandeur physique caractéristique de ce système :

$$\boxed{\sum_f \left| \langle \psi_f | \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)}$$

Facteur de structure dynamique $S(\vec{q},\omega)$

Définition

- Pour un système de Bosons dans l'état initial $|\psi_i\rangle$:

$$\boxed{S(\vec{q},\omega) = \sum_f \left|\langle\psi_f|\hat{\rho}_{\vec{q}}|\psi_i\rangle\right|^2 \delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar} - \omega\right)}$$

- Généralisation immédiate à un mélange statistique d'états $|\psi_i\rangle$.avec des poids π_i Il faut ajouter $\sum_i \pi_i$

Interprétation en termes de spectre

$S(\vec{q},\omega)$ est un spectre formé d'une série de fonctions delta

- centrées aux fréquences de Bohr $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$ du système de bosons.

- avec des intensités $\left|\langle\psi_f|\hat{\rho}_{\vec{q}}|\psi_i\rangle\right|^2$

Interprétation en termes de fonctions de corrélation

$$\delta\left(\omega_{fi}-\omega\right)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t\, e^{i\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)t/\hbar}$$

$$S(\vec{q},\omega)=\sum_f\left|\left\langle\psi_f\left|\hat{\rho}_{\vec{q}}\right|\psi_i\right\rangle\right|^2\delta(\omega_{fi}-\omega)$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t\, e^{-i\omega t}\times$$

$$\sum_f\left\langle\psi_i\left|\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\right|\psi_f\right\rangle\underbrace{\left\langle\psi_f\left|\hat{\rho}_{\vec{q}}\right|\psi_i\right\rangle e^{i(E_f-E_i)t/\hbar}}_{\left\langle\psi_f\left|e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\rho}_{\vec{q}}\, e^{-i\hat{H}t/\hbar}\right|\psi_i\right\rangle}$$

$$S(\vec{q},\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t\, e^{-i\omega t}\left\langle\psi_i\left|\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}(t=0)\,\hat{\rho}_{\vec{q}}(t)\right|\psi_i\right\rangle$$

Transformée de Fourier temporelle de la valeur moyenne dans ψ_i d'un produit de 2 opérateurs $\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}(t=0)$ et $\hat{\rho}_{\vec{q}}(t)$ pris ,dans le point de vue de Heisenberg, à des instants différents.

<u>Interprétation en termes de fonctions de corrélation</u> (suite)

Comme la transformée de Fourier d'un produit de convolution est un produit de transformées de Fourier, $S(\vec{q},\omega)$ peut encore être considéré comme la <u>transformée de Fourier spatio-temporelle</u> (en $\vec{r}$ et en *t*) de :

$$\int \mathrm{d}^3 r' \left\langle \psi_i \left| \hat{\rho}_I(\vec{r}',t=0)\,\hat{\rho}_I(\vec{r}'+\vec{r},t) \right| \psi_i \right\rangle$$

Corrélations entre les fluctuations de densité du système de bosons en 2 points différents séparés de $\vec{r}$ et à 2 instants différents.

Etude par diffusion de particules ou de photons de la dynamique des fluctuations d'un système de *N* atomes.

Calcul de $S(\vec{q},\omega)$ dans un cas simple

N bosons sans interactions dans l'état :

$$\left|\psi_i\right\rangle = \left|n_i,\ldots n_\alpha,\ldots\right\rangle$$

$\{\left|\varphi_\alpha\right\rangle\}$: base orthonormée d'états à une particule, d'énergies ε_α

$$\hat{\rho}_{\vec{q}} = \sum_{i=1}^{N} e^{i\vec{q}.\hat{\vec{r}}_i} = \sum_\alpha \sum_\beta \hat{a}_\beta^+ \hat{a}_\alpha \left\langle \varphi_\beta \left| e^{i\vec{q}.\hat{\vec{r}}} \right| \varphi_\alpha \right\rangle$$

$$\hat{\rho}_{\vec{q}}\left|\psi_i\right\rangle = \hat{\rho}_{\vec{q}}\left|n_1,\ldots n_\alpha,\ldots n_\beta,\ldots\right\rangle =$$

$$\sum_\alpha n_\alpha \left\langle \varphi_\alpha \left| e^{i\vec{q}.\hat{\vec{r}}} \right| \varphi_\alpha \right\rangle \left|n_1,\ldots n_\alpha,\ldots n_\beta,\ldots\right\rangle +$$

$$\sum_\alpha \sum_{\beta\neq\alpha} \sqrt{n_\alpha(n_\beta+1)} \left\langle \varphi_\beta \left| e^{i\vec{q}.\hat{\vec{r}}} \right| \varphi_\alpha \right\rangle$$

$$\left|n_1,\ldots n_\alpha-1,\ldots n_\beta+1,\ldots\right\rangle$$

$\left|\psi_i\right\rangle$ et $\left|\psi_f\right\rangle$ doivent être identiques ou différer par 2 nombres d'occupation.

Expression obtenue pour $S(\vec{q},\omega)$

Aux 2 types d'états pour ψ_f correspondent 2 types de termes pour $S(\vec{q},\omega)$

$$S(\vec{q},\omega) = S_{el}(\vec{q})\,\delta(\omega) + S_{inel}(\vec{q},\omega)$$

$$S_{el}(\vec{q}) = \left|\langle\psi_i|\hat{\rho}_{\vec{q}}|\psi_i\rangle\right|^2$$

$$= \left|\sum_\alpha n_\alpha \langle\varphi_\alpha|e^{i\vec{q}.\hat{\vec{r}}}|\varphi_\alpha\rangle\right|^2$$

$$= \left|\int \mathrm{d}^3r \langle\psi_i|\hat{\rho}_I(\vec{r})|\psi_i\rangle e^{i\vec{q}.\vec{r}}\right|^2$$

$$S_{inel}(\vec{q},\omega) = \sum_\alpha \sum_{\beta\neq\alpha} n_\alpha (n_\beta + 1) \times$$

$$\left|\langle\varphi_\beta|e^{i\vec{q}.\vec{r}}|\varphi_\alpha\rangle\right|^2 \delta\left[\omega - \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{\hbar}\right]$$

Discussion physique

Premier terme : $S_{el}(\vec{q})\delta(\omega)$

Diffusion élastique sans changement d'état du système cible de bosons.

Pas de changement d'énergie de la particule sonde diffusée

$S_{el}(\vec{q})$ est le module carré de la transformée de Fourier de la densité spatiale moyenne dans l'état initial ψ_i.

Deuxième terme : $S_{inel}(\vec{q},\omega)$

Diffusion inélastique : Un boson passe de l'état φ_α à l'état φ_β , ce qui nécessite un transfert d'énergie $\hbar\omega = \varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha$ de la part de la particule sonde.

$n_a(n_\beta + 1)$; Facteur bosonique

<u>Approximation quasi-statique</u>

L'énergie $\hbar\omega$ perdue par la particule sonde au cours de la diffusion sert à créer des excitations élémentaires dans le sysyème cible.

L'énergie initiale E_{in} de la particule sonde est supposée très grande devant $\hbar\omega$.

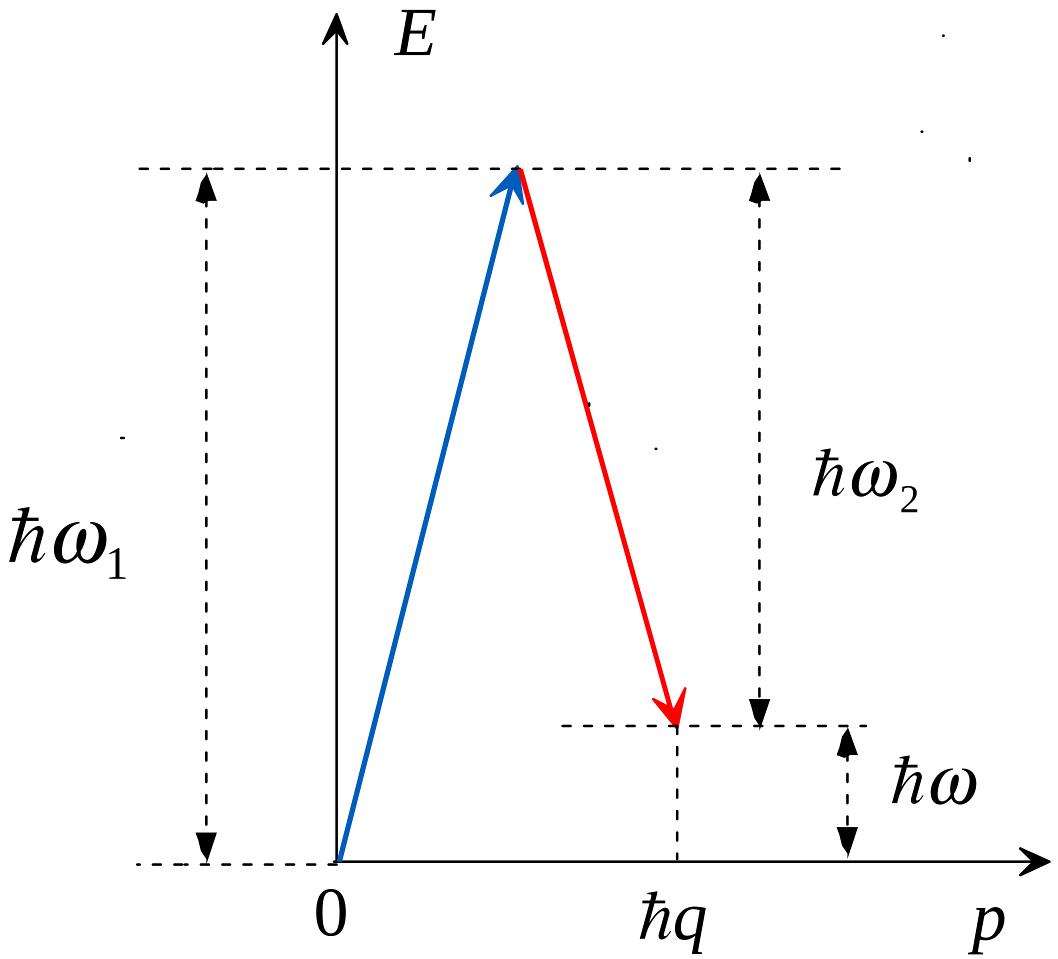
Quand E_{in} diminue de $\hbar\omega$, le module de l'impulsion de la particule sonde varie donc très peu, et on peut négliger la variation du transfert d'impulsion $\hbar\vec{q}$ quand ω varie sur l'étendue du spectre des excitations.

Le transfert d'impulsion $\hbar\vec{q}$ est essentiellement déterminé par <u>l'angle</u> θ entre les impulsions initiale et finale de la particule sonde.

Exemple de la diffusion de Bragg

Absorption de $\vec{k}_1, \omega_1$ et émission stimulée de $\vec{k}_2, \omega_2$

$\vec{k}_2$ et $\vec{k}_1$ de directions opposées



$$\omega_1, \omega_2 >> \omega \Rightarrow \hbar q \approx 2\hbar\omega_1 / c$$

On peut négliger les variations de q quand on fait varier ω

Facteur de structure statique $S(\vec{q})$

Définition

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N}\int \mathrm{d}\omega\, S(\vec{q},\omega)$$

Interprétation (dans le cadre de l'approximation quasi-statique)

Intensité totale diffusée par atome cible dans la direction de $\vec{q}$

Expression équivalente pour $S(\vec{q})$

$$S(\vec{q},\omega) = \sum_f \left|\left\langle \psi_f \middle| \hat{\rho}_{\vec{q}} \middle| \psi_i \right\rangle\right|^2 \delta\left[\omega - \frac{E_f - E_i}{\hbar}\right]$$

$$\begin{aligned} S(\vec{q}) &= \frac{1}{N}\sum_f \left|\left\langle \psi_f \middle| \hat{\rho}_{\vec{q}} \middle| \psi_i \right\rangle\right|^2 \\ &= \frac{1}{N}\sum_f \left\langle \psi_i \middle| \hat{\rho}^+_{\vec{q}} \middle| \psi_f \right\rangle \left\langle \psi_f \middle| \hat{\rho}_{\vec{q}} \middle| \psi_i \right\rangle \\ &= \frac{1}{N}\left\langle \psi_i \middle| \hat{\rho}^+_{\vec{q}}\hat{\rho}_{\vec{q}} \middle| \psi_i \right\rangle \end{aligned}$$

Interprétation en termes de fonctions de corrélation

$\hat{\rho}^{+}_{\vec{q}}\hat{\rho}_{\vec{q}}$ est un produit de 2 transformées de Fourier (T.F.).

C'est donc la T.F. d'un produit de convolution.

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N}\langle \psi_i | \hat{\rho}^{+}_{\vec{q}}\hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_i \rangle$$

est donc la T.F. spatiale (par rapport à $\vec{r}$ de

$$\frac{1}{N}\int \mathrm{d}^3 r' \langle \psi_i | \hat{\rho}_I(\vec{r}')\hat{\rho}_I(\vec{r}'+\vec{r}) | \psi_i \rangle$$

D'après T-14, $\hat{\rho}_I(\hat{r}')\hat{\rho}_I(\hat{r}'+\vec{r}) =$ **+**

$$\hat{\rho}_I(\vec{r}')\delta(\vec{r}) + \hat{\rho}_{II}(\vec{r}',\vec{r}'+\vec{r})$$

$S(\vec{q})$ est donc la T.F. spatiale de

$$\delta(\vec{r}) + \frac{1}{N}\int \mathrm{d}^3 r' \langle \psi | \hat{\rho}_{II}(\vec{r}',\vec{r}'+\vec{r}) | \psi \rangle$$

Importance de $S(\vec{q})$

On mesure $S(\vec{q})$ pour diverses orientations de $\vec{q}$ en étudiant les variations correspondantes du nombre total de particules sondes diffusées.

Par T.F. inverse (et après soustraction de 1), on en déduit la quantité

$$\int \mathrm{d}^3 r' \left\langle \psi_i \middle| \hat{\rho}_{II}(\vec{r}', \vec{r}' + \vec{r}) \middle| \psi_i \right\rangle$$

probabilité de trouver 2 atomes <u>différents</u> du système cible séparés de $\vec{r}$

Fonction importante relative au système cible caractérisant les corrélations, à un instant donné, entre les positions des divers atomes.

Polarisabilité dynamique

Notations

Système S - Hamiltonien $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 \left|\psi_n\right\rangle = E_n \left|\psi_n\right\rangle$$

Etat initial : état fondamental $\left|\psi_0\right\rangle$

$$\omega_{n0} = \left(E_n - E_0\right)/\hbar$$

Perturbation sinusoïdale

$$\hat{H}_{int}(t) = \frac{\lambda}{2}\left[\hat{A}e^{-i\omega t} + \hat{A}^{+}e^{i\omega t}\right]$$

λ : constante réelle

Perturbation branchée adiabiatiquement entre $t = -\infty$ et $t = 0$ pour éviter les régimes transitoires $e^{\pm i\omega t} \rightarrow e^{\pm i\omega t}e^{\eta t}$ avec $\eta \rightarrow 0_+$

Valeur moyenne $\left\langle \hat{B} \right\rangle$ de $\hat{B}$ dans l'état perturbé à l'ordre 1 en λ :

$$\left\langle \hat{B}(t) \right\rangle = \frac{\lambda}{2}\left[\chi_{BA}(\omega)e^{-i\omega t} + \chi_{BA^+}(-\omega)e^{i\omega t}\right]$$

χ : Polarisabilité dynamique

Equation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle=\left[\hat{H}_0+\hat{H}_{int}(t)\right]\left|\psi(t)\right\rangle$$

$$\left|\psi(t)\right\rangle=\sum_n c_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}\left|\psi_n\right\rangle$$

Ordre 0 en λ

$c_0(t)=1$ $\qquad c_n(t)=0$ $\qquad$ si $\qquad n\neq 0$

Ordre 1 en λ (on suppose $\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\psi_0\right\rangle=0$)

$$\dot{c}_n(t)=-\frac{i\lambda}{2\hbar}\left[e^{i(\omega_{n0}-\omega-\mathrm{i}\eta)t}A_{n0}+e^{i(\omega_{n0}+\omega-\mathrm{i}\eta)t}A_{n0}^{+}\right]$$

$$A_{n0}=\left\langle\psi_n\middle|\hat{A}\middle|\psi_0\right\rangle$$

$$c_n(t)=\frac{\lambda}{2\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{n0}-\omega)t}}{\omega-\omega_{n0}+i\eta}A_{n0}-\frac{e^{i(\omega_{n0}+\omega)t}}{\omega+\omega_{n0}-i\eta}A_{n0}^{+}\right]$$

En reportant dans $\left|\psi(t)\right\rangle$, on obtient

$$e^{iE_0t/\hbar}\left|\psi(t)\right\rangle=\left|\psi_0\right\rangle+\sum_{n\neq 0}(\lambda/2\hbar)\times$$

$$\left[\frac{e^{-i\omega t}}{\omega-\omega_{n0}+i\eta}A_{n0}-\frac{e^{i\omega t}}{\omega+\omega_{n0}-i\eta}A_{n0}^{+}\right]\left|\psi_n\right\rangle$$

Calcul de $\left\langle \hat{B}(t) \right\rangle$ (à l'ordre 1 en λ)

En reportant l'expression ainsi obtenue de $\left|\psi(t)\right\rangle$ dans $\left\langle \hat{B}(t) \right\rangle = \left\langle \psi(t) \middle| \hat{B} \middle| \psi(t) \right\rangle$,

on obtient (on suppose $B_{00}=0$)

$$\left\langle \hat{B}(t) \right\rangle = \frac{\lambda}{2}\left[\chi_{BA}(\omega) e^{-i\omega t} + \chi_{BA^+}(-\omega) e^{i\omega t}\right]$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{n\neq 0}\left[\frac{B_{0n}A_{n0}}{\omega-\omega_{n0}+i\eta} - \frac{A_{0n}B_{n0}}{\omega+\omega_{n0}+i\eta}\right]$$

$$\chi_{BA^+}(-\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{n\neq 0}\left[\frac{A^+_{0n}B_{n0}}{\omega-\omega_{n0}-i\eta} - \frac{B_{0n}A^+_{n0}}{\omega+\omega_{n0}-i\eta}\right]$$

Remarque

Les états excités $\left|\psi_n\right\rangle$ de $\hat{H}_0$ forment en général un spectre continu. La limite $\eta \to 0_+$ ne pose pas alors de problème. Si $\hat{H}_0$ a un vrai état discret $\left|\psi_d\right\rangle$, le branchement adiabatique est impossible pour $\omega = \omega_{d0}$

Un exemple important

Perturbation d'un condensat

par un potentiel $U_0 \cos(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega t)$ de vecteur d'onde $\vec{q}$ et de fréquence ω

$$\hat{H}_{int} = \sum_{i=1}^{N} U_0 \cos\left(\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i - \omega t\right)$$

$$= \frac{U_0}{2}\left(\sum_i e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}\right)e^{-i\omega t} + h\cdot c$$

$$= \frac{U_0}{2}\left[\hat{\rho}_{\vec{q}}e^{-i\omega t} + \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}e^{i\omega t}\right]$$

On a ici $\lambda = U_0$ $\hat{A} = \hat{\rho}_{\vec{q}}$

Cas de la diffusion de Bragg.

Réponse cherchée

On cherche l'onde de densité moyenne de même vecteur d'onde $\vec{q}$ et de même fréquence ω induite dans le condensat par une telle excitation.

$\langle B \rangle$ est donc la composante de $\langle \rho_I(\vec{r}) \rangle$ variant en $\exp\left[\pm i\left(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega t\right)\right]$

Composante $(\vec{q},\omega)$ de $\langle \hat{\rho}_I(\vec{r}) \rangle$

$$\hat{\rho}_I(\vec{r}) = L^{-3} \sum_{\vec{k}} \hat{\rho}_{\vec{k}}\, e^{-i\,\vec{k}.\vec{r}} \quad \text{(voir T-10)}$$

La composante $\vec{q}$ de $\langle \hat{\rho}_I(\vec{r}) \rangle$ provient de

$$L^{-3} \langle \hat{\rho}_{-\vec{q}} \rangle e^{i\,\vec{q}.\vec{r}} = L^{-3} \langle \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+} \rangle e^{i\,\vec{q}.\vec{r}}$$

puisque $\hat{\rho}_{-\vec{q}} = \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}$. On a donc : $\hat{B} = L^{-3}\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}$

Récapitulation : Pour calculer la composante $(\vec{q},\omega)$ de la réponse en densité à une excitation $U_0 \cos(\vec{q}.\vec{r} - \omega t)$, il faut prendre :

$$\lambda = U_0 \qquad \hat{A} = \hat{\rho}_{\vec{q}} \qquad \hat{B} = L^{-3}\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}$$

La susceptibilité concernée est $\chi_{\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\hat{\rho}_{\vec{q}}}$

Conclusion L'excitation $U_0 \cos(\vec{q}.\vec{r} - \omega t)$ produit une onde de densité moyenne

$$\frac{U_0}{2L^3} \chi_{\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\hat{\rho}_{\vec{q}}}(\omega)\, e^{i(\vec{q}.\vec{r} - \omega t)} + c.c.$$

Notation plus simple pour $\chi_{\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\hat{\rho}_{\vec{q}}}(\omega)$

$$\chi_{\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\hat{\rho}_{\vec{q}}}(\omega)=\chi(\vec{q},\omega)$$

Fonction de réponse "densité-densité"

Expression de $\chi(\vec{q},\omega)$

$$\chi(\vec{q},\omega)=\frac{1}{\hbar}\sum_{n\neq 0}\left[\frac{\left(\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\right)_{0n}\left(\hat{\rho}_{\vec{q}}\right)_{n0}}{\omega-\omega_{n0}+i\eta}-\frac{\left(\hat{\rho}_{\vec{q}}\right)_{0n}\left(\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\right)_{n0}}{\omega+\omega_{n0}+i\eta}\right]$$

$$=\sum_{n\neq 0}\left[\frac{\left|\langle\psi_n|\hat{\rho}_{\vec{q}}|\psi_0\rangle\right|^2}{\hbar\omega-E_n+E_0+i\eta}-\frac{\left|\langle\psi_n|\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}|\psi_0\rangle\right|^2}{\hbar\omega+E_n-E_0+i\eta}\right]$$

Cas d'un système invariant

- par réflexion d'espace
- ou par renversement du temps

On a alors

$$\left|\langle\psi_n|\hat{\rho}_{\vec{q}}|\psi_0\rangle\right|^2=\left|\langle\psi_n|\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}|\psi_0\rangle\right|^2$$

et par suite

$$\chi(\vec{q},\omega)=\sum_{n\neq 0}\left|\langle\psi_n|\hat{\rho}_{\vec{q}}|\psi_0\rangle\right|^2\frac{2\left(E_n-E_0\right)}{\hbar^2\left(\omega+i\eta\right)^2-\left(E_n-E_0\right)^2}$$

Limite $\omega \to 0$

Excitation statique $U_0 \cos \vec{q} \cdot \vec{r}$

$\chi(\vec{q},0)$ décrit alors la réponse statique en densité.

Apparition d'une onde de densité moyenne de vecteur d'onde $\vec{q}$

$$\frac{U_0}{2L^3}\chi(\vec{q},0)e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + cc\cdot = \frac{U_0}{L^3}\chi(\vec{q},0)\cos(\vec{q}\cdot\vec{r})$$

$\chi(\vec{q},0)$: Susceptibilité statique

$$\chi(\vec{q},0) = -\sum_{n\neq 0}\frac{\left|\langle\psi_n|\hat{\rho}_{\vec{q}}|\psi_0\rangle\right|^2 + \left|\langle\psi_n|\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}|\psi_0\rangle\right|^2}{E_n - E_0}$$

Pour un système invariant par réflexion d'espace ou de temps

$$\chi(\vec{q},0) = -2\sum_{n\neq 0}\frac{\left|\langle\psi_n|\hat{\rho}_{\vec{q}}|\psi_0\rangle\right|^2}{E_n - E_0}$$

Remarque

En toute rigueur, la réponse statique en $\cos\left(\vec{q}\cdot\vec{r}\right)$ fait intervenir aussi la limite $\omega \to 0$ de la réponse $(\vec{q},-\omega)$ en $\cos\left(\vec{q}\cdot\vec{r}+\omega t\right)$, proportionnelle à $\chi_{\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}}$

Mais on montrera plus loin que, pour un condensat homogène (ou d'extension spatiale $R \gg q^{-1}$), on a

$$\chi_{\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}} = 0$$

de sorte qu'il suffit de considérer $\chi_{\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}\hat{\rho}_{\vec{q}}}$ comme nous le faisons ici

Moments de $S(\vec{q},\omega)$

Définition du moment d'ordre k

$$m_k(\vec{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{q},\omega)\,\omega^k \mathrm{d}\omega$$

Expression de $m_k(\vec{q})$

$$S(\vec{q},\omega) = \sum_n \left|\langle \psi_n | \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle\right|^2 \delta\left(\omega - \frac{E_n - E_0}{\hbar}\right)$$

$$m_k(\vec{q}) = \sum_n \left|\langle \psi_n | \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle\right|^2 \times$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(\omega - \frac{E_n - E_0}{\hbar}\right)\omega^k d\omega$$

$$m_k(\vec{q}) = \sum_n \left|\langle \psi_n | \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle\right|^2 \left(\frac{E_n - E_0}{\hbar}\right)^k$$

Comme $S(\vec{q},\omega)$ est une densité spectrale

$$\langle \omega^k \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{q},\omega)\,\omega^k \mathrm{d}\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{q},\omega)\,\mathrm{d}\omega} = \frac{m_k}{m_0}$$

Expression équivalente pour $m_0(\vec{q})$

$$m_0(\vec{q}) = \sum_n \left| \langle \psi_n | \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle \right|^2 = \langle \psi_0 | \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+} \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle$$

$$\boxed{m_0(\vec{q}) = N\, S(\vec{q})}$$

Expression équivalente pour $m_1(\vec{q})$

(Système invariant par P ou T)

$$m_1(\vec{q}) = \frac{1}{2\hbar} \langle \psi_0 | \left[\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}, \left[\hat{H}_{0,} \hat{\rho}_{\vec{q}} \right] \right] | \psi_0 \rangle$$

Démonstration

$$\left[\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}, \left[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\vec{q}} \right] \right] = \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+} H_0 \hat{\rho}_{\vec{q}} + \hat{\rho}_{\vec{q}} \hat{H}_0 \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}$$

$$- \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+} \hat{\rho}_{\vec{q}} \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{\rho}_{\vec{q}} \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+}$$

$$\langle \psi_0 | \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+} H_0 \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle = \sum_n E_n \left| \langle \psi_n | \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle \right|^2$$

$$= \langle \psi_0 | \hat{\rho}_{\vec{q}} \hat{H}_0 \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+} | \psi_0 \rangle$$

$$\langle \psi_0 | \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+} \hat{\rho}_{\vec{q}} \hat{H}_0 | \psi_0 \rangle = E_0 \sum_n \left| \langle \psi_n | \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle \right|^2$$

$$= \langle \psi_0 | \hat{H}_0 \hat{\rho}_{\vec{q}} \hat{\rho}_{\vec{q}}^{+} | \psi_0 \rangle$$

$$\langle \psi_0 | [\,,[\,,]] | \psi_0 \rangle = 2 \sum_n (E_n - E_0) \left| \langle \psi_n | \hat{\rho}_{\vec{q}} | \psi_0 \rangle \right|^2$$

$$= 2\hbar\, m_1(\vec{q})$$ CQFD

Généralisation

On démontrerait de même

$$\hbar^2 m_2(\vec{q}) = \left\langle \psi_0 \left\| \left[\hat{\rho}_{\vec{q}}^+, \hat{H}_0 \right] \left[\hat{H}_0, \hat{\rho}_q \right] \right\| \psi_0 \right\rangle$$

$$\hbar^3 m_3(\vec{q}) = \frac{1}{2} \left\langle \left[\left[\hat{\rho}_{\vec{q}}^+, \hat{H}_0 \right], \left[\hat{H}_0, \left[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\vec{q}} \right] \right] \right] \right\rangle$$

Moment d'ordre –1 : $m_{-1}(\vec{q})$

La méthode précédente ne s'applique pas pour

$$m_{-1}(\vec{q}) = \hbar \sum_{n \neq 0} \frac{\left| \left\langle \psi_n \left| \hat{\rho}_{\vec{q}} \right| \psi_0 \right\rangle \right|^2}{E_n - E_0}$$

En comparant avec (T-39) on voit alors que

$$\boxed{m_{-1}(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{2} \chi(\vec{q}, 0)}$$

Le moment d'ordre –1 est relié à la susceptibilité statique.

Comment aller plus loin ?

$\hat{\rho}_{\vec{q}} = \sum_{i=1}^{N} e^{i\,\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i}$ ne dépend que des opérateurs de positions.

Si, dans $\hat{H}_0$, le seul terme dépendant des opérateurs impulsions $\hat{\vec{p}}_i$ est l'énergie cinétique $\hat{K} = \sum_{i=1}^{N} \vec{p}_i^{\,2} / 2m$, on peut remplacer $\hat{H}_0$ par $\hat{K}$ dans tous les commutateurs. Il faut alors calculer les commutateurs $\left[\hat{K}, \hat{\rho}\right]$

Exemple : calcul de $m_1(\vec{q})$

$$\left[A^2, B\right] = A[A,B] + [A,B]A$$

$$\left[\hat{\vec{p}}_i^{\,2}, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}\right] = \hat{\vec{p}}_i \cdot \left[\hat{\vec{p}}_i, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}\right] + \left[\hat{\vec{p}}_i, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}\right] \cdot \hat{\vec{p}}_i$$

$$\left[\hat{\vec{p}}_i, F\left(\hat{\vec{r}}_i\right)\right] = -i\hbar\vec{\nabla}F\left(\hat{\vec{r}}_i\right)$$

$$\left[\hat{\vec{p}}_i^{\,2}, e^{i\,\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i}\right] = \hbar\,\vec{q}\cdot\left[\hat{\vec{p}}_i e^{i\,\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i} + e^{i\,\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i}\,\hat{\vec{p}}_i\right]$$

On en déduit

$$\left[e^{-i\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i},\left[\hat{\vec{p}}_i^{\,2},e^{i\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i}\right]\right]=$$

$$\hbar\vec{q}\cdot\left(\hbar\vec{q}+\hbar\vec{q}\right)=2\hbar^2q^2$$

et par suite

$$\left[\hat{\rho}_{\vec{q}}^{+},\left[\hat{H}_0,\hat{\rho}_{\vec{q}}\right]\right]=\sum_{i=1}^{N}\left[e^{-i\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i},\left[\frac{\hat{\vec{p}}_i^{\,2}}{2m},e^{i\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}_i}\right]\right]$$

$$=N\,\frac{\hbar^2q^2}{m}$$

Compte tenu de (T-43), il vient

$$\boxed{m_1\left(\vec{q}\right)=N\,\frac{\hbar q^2}{2m}}$$

Relation <u>exacte</u> moyennant les hypothèses

- Invariance de $\hat{H}_0$ / P ou T
- Pas de termes dépendant des $\vec{p}_i$ autres que l'énergie cinétique dans $\hat{H}_0$

Règle de somme analogue à celle de la physique atomique

Intérêt de telles règles de somme

1–Relations exactes, indépendantes de la connaissance exacte du spectre de $\hat{H}_0$

Permettent de tester des modèles approchés.

2–Permettent d'évaluer des caractéristiques du spectre $S(\vec{q},\omega)$

Centre $\langle\omega\rangle$

$$\langle\omega\rangle = \frac{m_1}{m_0}$$

Largeur $\Delta\omega$

$$(\Delta\omega)^2 = \left\langle\left(\omega - \langle\omega\rangle\right)^2\right\rangle = \langle\omega^2\rangle - \langle\omega\rangle^2$$

$$= \frac{m_2}{m_0} - \left(\frac{m_1}{m_0}\right)^2$$

Quelques références générales

1. L. Van Hove, Phys. Rev. **95**, 249 (1954)
2. P. Nozières, D. Pines, The theory of quantum liquids, Volumes I and II, Advanced Book Classics, Addison Wesley, 1990.
3. C. Cohen-Tannoudji, Compléments de Mécanique Quantique, Cours de 2ème année de 3ème cycle, 1966, p.167, Notes de cours rédigées par S. Haroche, disponibles sur le WEB à l'adresse : www.phys.ens.fr (cliquer sur séminaires et cours, puis sur cours donnés par des membres du département).