

Bosons en interaction dans une boîte Transformation de Bogolubov (suite)

⑤ Excitations élémentaires du gaz de bosons

a - Relations de dispersion

Compte tenu de la relation (7.58) qui permet d'annuler la 3^{ème} ligne de (7.57), la 2^{ème} ligne de (7.57) devient :

$$\sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (u_k^2 + v_k^2 + 2u_k v_k) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} \quad (8.1)$$

En utilisant les expressions (7.63) et (7.64) de u_k^2 , v_k^2 , $u_k v_k$, on transforme alors (8.1) en $\sum_{\vec{k}} \hbar \omega(k) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$ où

$$\hbar \omega(k) = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)} \quad (8.2)$$

b - Quelques repères importants dans l'échelle des valeurs de k.

- Quand k croît de 0 à $+\infty$, $\tilde{V}(k)$ décroît en général de $\tilde{V}(0) = 4\pi\hbar^2 a/m$ à 0. La valeur de k au delà de laquelle $\tilde{V}(k)$ décroît significativement est de l'ordre de $1/r_e$ où r_e caractérise la portée du potentiel $V(r)$.
- Il existe une autre valeur importante k_0 dans l'échelle des valeurs de k, celle pour laquelle les 2 termes $\hbar^2 k^2/2m$ et $\rho \tilde{V}(k)$ sont du même ordre de grandeur

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \rho \tilde{V}(k_0) \quad (8.3)$$

En fait, comme nous allons le vérifier plus loin, k_0 est beaucoup plus petit que $1/r_e$ où r_e est la portée du potentiel, de sorte que l'on peut remplacer $\tilde{V}(k_0)$ par $\tilde{V}(0) = 4\pi\hbar^2 a/m$ dans (8.3) qui donne alors

$$k_0 = \sqrt{8\pi a \rho} = 1/\xi_0 \quad (8.4)$$

où ξ_0 est la longueur de relaxation introduite dans le cours V.

- Vérifions maintenant que $k_0 \ll \frac{1}{r_e}$, c-à-d que $\xi_0 \gg r_e$

D'après (8.4)

$$\xi_0 \sim \frac{1}{\sqrt{\rho a}} = \frac{a}{\sqrt{\rho a^3}} \quad (8.5)$$

Nous supposons ici le gaz très dilué, de sorte que

$$\rho a^3 \ll 1 \quad (8.6)$$

On en déduit que $\xi_0 \gg a$, de sorte que si a et r_e sont du même ordre de grandeur, on a bien $\xi_0 \gg r_e$.

c - Discussion physique

Existence de 2 régimes

- Pour $k \ll k_0$, on peut négliger dans la parenthèse de (8.2) $\hbar^2 k^2 / 2m$ devant $2\rho \tilde{V}(k)$, qu'on peut également remplacer par $2\rho \tilde{V}(0) = 8\pi a \rho \hbar^2 / m$. On obtient alors

$$\omega(k) = c k \quad (8.7)$$

où

$$c = 2 \frac{\hbar}{m} \sqrt{\pi a \rho} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m \xi_0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar k_0}{m} \quad (8.8)$$

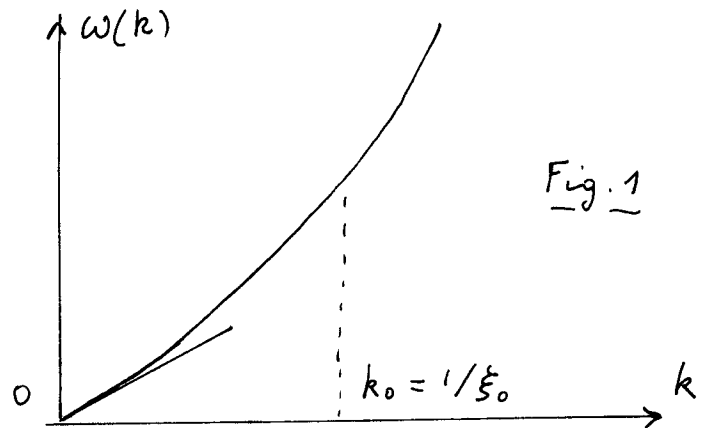
Les excitations élémentaires du gaz de bosons sont alors des phonons, caractérisés par une relation de dispersion linéaire en k , c'est à dire par une vitesse de propagation c donnée par (8.8).

- Pour $k \gg k_0$, on peut au contraire négliger $2\rho \tilde{V}(k)$ devant $\hbar^2 k^2 / 2m$ dans (8.2) qui donne alors

$$\omega(k) = \hbar \frac{k^2}{2m} \quad (8.9)$$

Les excitations élémentaires correspondent alors au spectre d'énergie d'une particule libre de masse m .

- Ces résultats sont regroupés sur la figure 1 qui donne les variations de $\omega(k)$ avec k



- Revenons enfin à (7.59). Il apparaît clairement sur cette équation que, pour $k \ll k_0$, $\tanh 2\theta_k \simeq 1$, de sorte que $\theta_k \gg 1$. On a alors $u_k = \cosh \theta_k \simeq v_k = \sinh \theta_k$. D'après (7.52), les excitations élémentaires $\vec{k}$ sont des superpositions linéaires à poids égaux d'un "trou" $-\vec{k}$ et d'une particule $\vec{k}$.

Par contre quand $k \gg k_0$, $\tanh 2\theta_k \simeq 0$ de sorte que $\theta_k \ll 1$. On a alors $u_k = \cosh \theta_k \gg v_k = \sinh \theta_k$. Les excitations élémentaires sont alors pratiquement des états de particule $\vec{k}$.

- Il apparaît clairement sur la figure 1 que le spectre des excitations élémentaires croît de manière continue à partir de 0 et ne présente plus le "gap" prévu par le calcul perturbatif du § 3.
- Notons cependant que la densité d'états est diminuée au voisinage de 0, par rapport à celle correspondant à une par-ticule libre (la densité d'états associée à une relation de dispersion linéaire est en effet plus faible que celle associée à une relation de dispersion quadratique).

⑥ Energie E_0 de l'état fondamental

a - Calcul de E_0

- Comme le vecteur d'onde $k_0 = 1/\xi_0$ qui caractérise les variations de $u_k^2, v_k^2, u_k v_k$ est très petit devant $1/r_0$, où r_0 est la portée du potentiel $V(r)$, nous allons négliger ici la portée du potentiel, ce qui revient à remplacer $V(r)$ par V_{pseudo} . De plus, nous utiliserons pour simplifier V_g au lieu de V_{pseudo} et nous nous appuierons sur les résultats du § 36 du cours VII pour résoudre les problèmes de divergence que nous rencontrerons.

- Si l'on remplace $V(r)$ par V_g , on peut utiliser les expressions (7.65) de $u_k^2, v_k^2, u_k v_k$. Reportons ces expressions dans la 1^{re} ligne de (7.57) qui n'est autre que l'énergie E_0 de l'état fondamental de Hef. Remplaçons également dans cette expression $\tilde{V}(0)$ par $4\pi\hbar^2 a/m$ et introduisons la variable sans dimension

$$x = \frac{k}{k_0} \quad (8.10)$$

Il vient :

$$\begin{aligned} E_0 &= N \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \rho + \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{1}{2} \left[\frac{x^2+1}{x\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] + \frac{4\pi\hbar^2 \rho a}{m} \frac{1}{2} \left[\frac{x}{\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] \right\} \\ &= N \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \rho + \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \rho \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left\{ x^2 \left[\frac{x^2+1}{x\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] + \left[\frac{x}{\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] \right\} \\ &= \frac{2\pi\hbar^2 a \rho}{m} \left\{ N + \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left[x\sqrt{x^2+2} - 1 - x^2 \right] \right\} \quad (8.11) \end{aligned}$$

- Etudions le comportement de la somme sur k aux grands k , c'est à dire aux grands $x = k/k_0$

$$\sqrt{x^2+2} = x(1 + \frac{2}{x^2})^{1/2} = x \left[1 + \frac{1}{x^2} - \frac{1}{2} \frac{1}{x^4} + O(\frac{1}{x^6}) \right] \quad (8.12)$$

On en déduit

$$\left[x\sqrt{x^2+2} - 1 - x^2 \right]_{x \gg 1} \simeq -\frac{1}{2x^2} + O\left(\frac{1}{x^4}\right) \quad (8.13)$$

Comme $\sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{2x^2} = -\frac{k_0^2}{2} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2}$ diverge, on en conclut que l'expression (8.11) de E_0 contient une partie divergente donnée par

$$\begin{aligned} (E_0)_{div} &= -\frac{2\pi\hbar^2 a \rho}{m} \frac{k_0^2}{2} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{x^2} = -\frac{2\pi\hbar^2 a \rho}{m} \frac{1}{2} 8\pi a \rho \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2} \\ &= -\frac{8\pi^2 \hbar^2}{m} a^2 \rho^2 \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2} = -\frac{1}{2} \frac{m \rho^2}{\hbar^2} g^2 \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2} \quad (8.14) \end{aligned}$$

b - Elimination de la partie divergente de E_0

- Comparons (8.14) et (7.35). Si l'on remplace dans (7.35) $N(N-1)/L^6$ par $N^2/L^6 = (N/L^3)^2 = \rho^2$, on trouve que les 2 expressions sont égales. En d'autres termes, la partie divergente de E_0 n'est autre que l'expression du déplacement de l'état fondamental, calculé au 2^{ème} ordre en V_g .
- Or nous avons vu dans le § 3 b du cours VII qu'un tel calcul fait avec V_g est incorrect à cause de problèmes de convergence uniforme, et qu'un calcul correct fait avec V_{pseudo} donne un résultat nul [voir Eq. (7.41)]. La divergence trouvée en (8.14) est donc artificielle et est liée à l'utilisation de V_g à des ordres supérieurs. Une utilisation de V_{pseudo} dès le début, basée sur l'expression (7.18) de H_{int} , conduirait à remplacer (8.14) par 0. Nous ne refaisons pas ici un tel calcul, qui serait fort long, et admettrons le résultat [voir Ref [7]].
- Pour éliminer la partie divergente de E_0 , nous ajouterons simplement un terme $+\frac{1}{2x^2}$ au crochet de la somme sur $\vec{k}$ de (8.11) [voir (8.13)]. La nouvelle expression de E_0 devient (en mettant N en facteur):

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2 a \rho N}{m} \left\{ 1 + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left[x\sqrt{x^2+2} - 1 - x^2 + \frac{1}{2x^2} \right] \right\} \quad (8.15)$$

Remplaçons la somme sur $\vec{k}$ par une intégrale. Comme l'intégrale ne diverge pas en $\vec{k} = \vec{0}$, on peut s'affranchir de la restriction $\vec{k} \neq \vec{0}$

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \dots &\rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k_0^3 \int x^2 dx \dots \\ &= V 8 \sqrt{\frac{2}{\pi}} (a\rho)^{3/2} \int x^2 dx \dots \quad (8.16) \end{aligned}$$

En reportant (8.16) dans le 2^{ème} terme du crochet de (8.15), on fait apparaître ce 2^{ème} terme sous la forme

$$8 \sqrt{\frac{2}{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \underbrace{\int_0^\infty dx x^2 \left[x\sqrt{x^2+2} - 1 - x^2 + \frac{1}{2x^2} \right]}_I \quad (8.17)$$

- L'intégrale sur x de (8.17) est maintenant convergente. Pour la calculer, intégrons sur x de 0 à x_M , où $x_M \gg 1$. L'intégrale des 3 derniers termes, $-x^2, -x^4, +1/2$ est immédiate. Pour le 1^{er} terme, on prend x^2 comme variable. On obtient ainsi

$$I = \lim_{x_M \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{5} x_M^5 \left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{5/2} - \frac{2^{5/2}}{5} - \frac{2}{3} x_M^3 \left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{3/2} + 2 \frac{2^{3/2}}{3} - \frac{x_M^3}{3} - \frac{x_M^5}{5} + \frac{x_M}{2} \right\} \quad (8.18)$$

Il suffit alors de développer $\left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{5/2}$ et $\left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{3/2}$ en puissances de $1/x_M^2$ pour s'apercevoir que tous les termes en x_M, x_M^3, x_M^5 s'éliminent et pour obtenir

$$I = 2^{5/2} \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{5} \right) = \frac{2^{7/2}}{15} \quad (8.19)$$

- En reportant (8.15) dans (8.17), puis en remplaçant le 2^{ème} terme de l'accolade de (8.15) par (8.17), on obtient finalement

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2 a \rho}{m} N \left[1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \right] \quad (8.20)$$

c - Discussion physique

Comparaison avec les résultats du calcul variationnel (champ moyen)

- Dans l'approche variationnelle du cours V, l'énergie E_0 de l'état fondamental est approximée par le minimum de $E[\varphi] = \langle \varphi | H | \varphi \rangle / \langle \varphi | \varphi \rangle$ quand on fait varier $|\varphi\rangle$ dans le sous-espace des états produits $|\varphi(1)\rangle |\varphi(2)\rangle \dots |\varphi(i)\rangle \dots |\varphi(N)\rangle$. Rappelons que

$$E[\varphi] = E_{\text{cin}} + E_{\text{piège}} + E_{\text{int}} \quad (8.21)$$

et que le minimum de $E[\varphi]$ est atteint quand $|\varphi\rangle$ obéit à l'équation de Gross-Pitaevskii.

- Dans une boîte de côté L avec des conditions aux limites périodiques, la solution d'une telle équation est

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \quad (8.22)$$

(normalisation $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$). E_{cin} et $E_{\text{piège}}$ sont alors nuls et E_{int} est égal à [voir Eq. (5.24)] :

$$E_{\text{int}} = g \frac{N(N-1)}{2} \int d^3r |\varphi|^4 \simeq g \frac{N^2}{2} \int d^3r \frac{1}{L^6} = g \frac{N^2}{2} \frac{L^3}{L^6} = \frac{1}{2} g \rho N \quad (8.23)$$

Nous désignons maintenant N/L^3 par ρ (et non plus par n). En remplaçant g par $4\pi\hbar^2 a/m$, on obtient finalement

$$(E_0)_{\text{variét.}} = E[\varphi] = E_{\text{int}} = \frac{2\pi\hbar^2 a \rho}{m} N \quad (8.24)$$

Quant au potentiel chimique μ , il vaut :

$$\begin{aligned}
 (\mu)_{\text{varié}} &= \frac{\partial}{\partial N} (E_0(N))_{\text{varié}} = \frac{\partial}{\partial N} \left(g \frac{N^2}{2L^3} \right) \\
 &= g \frac{N}{L^3} = g \rho = \frac{4\pi \hbar^2 a \rho}{m} \quad (8.25)
 \end{aligned}$$

- En toute rigueur, un gaz de bosons dans une "vraie" boîte doit être décrit avec des conditions aux limites correspondant à l'annulation de $\psi(\vec{r})$ sur les parois de la boîte. Mais nous avons vu dans le § 4 du cours V que, sous l'effet des interactions, $\psi(\vec{r})$ devient uniforme dans tout le volume intérieur de la boîte, sauf dans une région d'extension ξ_0 au voisinage des parois, où ξ_0 est la longueur de relaxation. A la limite thermodynamique, $N \rightarrow \infty$, $V = L^3 \rightarrow \infty$ avec $N/V = \rho = \text{constante}$. ξ_0 reste alors constant et les corrections liées aux parois physiques tendent vers 0 quand $\xi_0/L \rightarrow 0$. Les résultats obtenus plus haut avec des conditions aux limites périodiques sont alors valables.

Corrections données par la théorie de Bogolubov

- Comparons (8.24) et (8.20). La contribution du terme 1 du crochet de (8.20) redonne le résultat (8.24) du calcul variationnel. On peut donc écrire

$$(E_0)_{\text{Bogol.}} = (E_0)_{\text{varié}} \left[1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \right] \quad (8.26)$$

- La correction introduite par la théorie de Bogolubov est donc, en valeur relative, égale à $\frac{128}{15\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2}$. On voit ainsi apparaître clairement l'infinitement petit qui caractérise une telle théorie et qui est égal à ρa^3 , c'est à dire au nombre de particules dans un volume a^3 . C'est la petitesse de ce paramètre qui permet de dire qu'un gaz de bosons en interaction est dilué.

- On peut également calculer la valeur du potentiel chimique dans la théorie de Bogolubov. Le terme correctif par rapport à la valeur (8.25) du calcul variationnel est obtenu en dérivant par rapport à N la contribution des 2^{ème} terme du crochet de (8.20). Il ne faut pas oublier la dépendance en N de $\rho = N/V$ qui fait que la contribution des 2^{ème} terme du crochet de (8.20) est proportionnelle à $N^{5/2}$. Après dérivation par rapport à N , on obtient finalement

$$(\mu)_{\text{Bogol.}} = \frac{\partial}{\partial N} (E_0)_{\text{Bogol.}} = (\mu)_{\text{varié}} \left[1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \right] \quad (8.27)$$

⑦ Depletion quantique de l'état fondamental

a - Nombre de particules hors de l'état $\vec{k} = \vec{0}$

- L'état fondamental du gaz de bosons est le vide des opérateurs $b_{\vec{k}}$ satisfaisant

$$b_{\vec{k}} |\psi_0\rangle = 0 \quad \forall \vec{k} \neq \vec{0} \quad (8.28)$$

et la relation adjointe

$$\langle \psi_0 | b_{\vec{k}}^\dagger = 0 \quad \forall \vec{k} \neq \vec{0} \quad (8.29)$$

- Un tel état ne correspond pas à une situation où tous les bosons seraient dans l'état $\vec{k} = \vec{0}$, situation décrite par l'état $|0\rangle = |n_0 = N\rangle$. Calculons le nombre moyen de particules hors de l'état $\vec{k} = \vec{0}$, $N - N_0$, quand le gaz de bosons est dans l'état fondamental $|\psi_0\rangle$

$$N - N_0 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \langle \psi_0 | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} | \psi_0 \rangle \quad (8.30)$$

Pour calculer (8.30), exprimons $a_{\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}^\dagger$ en fonction des $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^\dagger$ au moyen de (7.56) et utilisons (8.28) et (8.29). Il vient :

$$\begin{aligned} N - N_0 &= \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \langle \psi_0 | (u_k b_{\vec{k}}^\dagger - v_k b_{-\vec{k}}) (u_k b_{\vec{k}} - v_k b_{-\vec{k}}^\dagger) | \psi_0 \rangle \\ &= \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} v_k^2 \langle \psi_0 | b_{-\vec{k}} b_{-\vec{k}}^\dagger | \psi_0 \rangle = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} v_k^2 \end{aligned} \quad (8.31)$$

- Remplaçons la somme sur $\vec{k}$ de (8.31) par une intégrale et utilisons la 2^{ème} équation (7.65) (nous utilisons ici V_0). En introduisant comme plus haut $x = k/k_0$, on obtient

$$N - N_0 = \frac{L^3 k_0^3}{4\pi^2} J \quad (8.32)$$

où

$$J = \int_0^\infty dx \, x \left[\frac{x^2 + 1}{\sqrt{x^2 + 2}} - x \right] \quad (8.33)$$

L'intégrale donnant J est convergente. Pour la calculer, procédons comme dans le § 6b, en intégrant de 0 à $x_M \gg 1$, puis en prenant $x_M \rightarrow \infty$.

$$\begin{aligned} J &= \lim_{x_M \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{3} x_M^3 \left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{3/2} - \frac{2^{3/2}}{3} - x_M \left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{1/2} + 2^{1/2} - \frac{x_M^3}{3} \right] \\ &= -\frac{2\sqrt{2}}{3} + \sqrt{2} = \frac{\sqrt{2}}{3} \end{aligned} \quad (8.34)$$

$$\text{Par ailleurs, } \frac{L^3 k_0^3}{4\pi^2} = \frac{L^3}{4\pi^2 \xi_0^3} = \frac{L^3}{4\pi^2} \sqrt{8}^3 n \sqrt{n} \rho \sqrt{\rho} a^{3/2} = N \sqrt{\frac{32}{n}} (\rho a^3)^{1/2} \quad (8.35)$$

En reportant (8.34) et (8.35) dans (8.32), on obtient finalement

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{8}{3\sqrt{n}} (\rho a^3)^{1/2} \quad (8.36)$$

- La quantité $(N - N_0)/N$, proportion relative d'atomes hors de l'état $\vec{k} = \vec{0}$ est appelée "déplétion quantique" de l'état fondamental du gaz de bosons. On voit apparaître la même quantité sans dimension $(\rho a^3)^{1/2}$ que dans la correction à l'énergie de l'état fondamental [voir Eq. (8.20)].

b. Comparaisons avec les résultats du calcul variationnel

Comme nous l'avons déjà indiqué dans le § 6C, la solution de l'équation de Gross-Pitaevskii dans une boîte de côté L très grand correspond à une situation où tous les atomes sont dans l'état $\vec{k} = \vec{0}$. On a alors $N = N_0$ et $(N - N_0)/N = 0$. La théorie de Bogolubov permet donc de rendre compte du fait que les interactions viduent légèrement l'état $\vec{k} = \vec{0}$ en transférant une fraction des atomes dans les états $\vec{k} \neq \vec{0}$.

⑧ Densité à 2 corps pour un gaz de bosons dans l'état fondamental

a. Définition

- Commençons par rappeler la définition de la densité à 1 corps $\rho_I(\vec{r})$. C'est la densité de probabilité de trouver une particule quelconque au point $\vec{r}$, qu'on peut écrire dans le formalisme habituel

$$\rho_I(\vec{r}) = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^N \delta(\hat{\vec{r}}_i - \vec{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (8.37)$$

où $\hat{\vec{r}}_i$ est l'opérateur position de la particule i , et

$$\rho_I(\vec{r}) = \langle \Psi_0 | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (8.38)$$

en seconde quantification. Pour le gaz homogène étudié ici

$$\rho_I(\vec{r}) = \rho \quad \text{indépendant de } \vec{r} \quad (8.39)$$

- La densité à 2 corps $\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}')$ est la densité de probabilité de trouver une particule quelconque en $\vec{r}$ et une autre particule quelconque en $\vec{r}'$. L'équivalent des équations (8.37) et (8.38) est

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \delta(\hat{\vec{r}}_i - \vec{r}) \delta(\hat{\vec{r}}_j - \vec{r}') | \Psi_0 \rangle \quad (8.40)$$

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \Psi_0 | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (8.41)$$

b. Calcul de $\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}')$

- Dans les expressions (7.11) et (7.12) de $\hat{\psi}(\vec{r})$ et $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$, isolons les contributions de a_0 et $a_0^\dagger$

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} a_0 + \tilde{\psi}(\vec{r}) \quad \text{où} \quad \tilde{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{L^{3/2}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (8.42)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} a_0^\dagger + \tilde{\psi}^\dagger(\vec{r}) \quad \text{où} \quad \tilde{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{L^{3/2}} a_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (8.43)$$

- Reportons (8.42) et (8.43) dans (8.41) et, comme plus haut, ne gardons que les termes contenant 4 a_0 ou a_0^+ , 2 a_0 ou a_0^+ (la contribution des termes contenant 3 a_0 ou a_0^+ est nulle). Enfin, remplaçons a_0 et a_0^+ par $\sqrt{N}$ (sauf dans le terme contenant 4 a_0 ou a_0^+)

Terme contenant 4 a_0 ou a_0^+ . Même calcul que dans le § 4 b

$$\begin{aligned} \frac{1}{L^6} \langle \psi_0 | a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 | \psi_0 \rangle &= \frac{1}{L^6} \left[N(N-1) - 2N \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \langle \psi_0 | a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} | \psi_0 \rangle \right] \\ &\approx \rho^2 - 2 \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \text{sh}^2 \theta_k \end{aligned} \quad (8.44)$$

On a utilisé (8.31) et $v_k = \text{sh} \theta_k$.

Termes contenant 2 a_0 ou a_0^+ . On pose $\tilde{a}_0 = a_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ $\tilde{a}_0' = a_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}$

$$\frac{1}{L^6} \langle \psi_0 | \tilde{a}_{\vec{k}}^+ \tilde{a}_{-\vec{k}}^+ a_0 a_0 | \psi_0 \rangle \rightarrow - \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \text{sh} \theta_k \text{ch} \theta_k \quad (8.45.a)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \psi_0 | a_0^+ a_0^+ \tilde{a}_{-\vec{k}}' \tilde{a}_{\vec{k}}' | \psi_0 \rangle \rightarrow - \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \text{sh} \theta_k \text{ch} \theta_k \quad (8.46.b)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \psi_0 | a_0^+ \tilde{a}_{\vec{k}}^+ a_0 \tilde{a}_{\vec{k}}' | \psi_0 \rangle \rightarrow \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.46.c)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \psi_0 | \tilde{a}_{\vec{k}}^+ a_0^+ \tilde{a}_{\vec{k}}' a_0 | \psi_0 \rangle \rightarrow \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.46.d)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \psi_0 | a_0^+ \tilde{a}_{\vec{k}}^+ \tilde{a}_{\vec{k}}' a_0 | \psi_0 \rangle \rightarrow \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.46.e)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \psi_0 | \tilde{a}_{\vec{k}}^+ a_0^+ a_0 \tilde{a}_{\vec{k}}' | \psi_0 \rangle \rightarrow \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.46.f)$$

On constate que les 2 derniers termes (8.46.e) et (8.46.f) compensent le dernier terme de (8.44) et on obtient

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') = \rho^2 [1 - \chi(\vec{r} - \vec{r}')] \quad (8.47)$$

où

$$\chi(\vec{s}) = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}} [\text{sh}^2 \theta_k - \text{sh} \theta_k \text{ch} \theta_k] \quad (8.48)$$

Le remplacement dans (8.48) de la somme sur $\vec{k}$ par une intégrale et l'utilisation des équations (7.65) donnant $v_k^2 = \text{sh}^2 \theta_k$ et $u_k v_k = \text{ch} \theta_k \text{sh} \theta_k$ conduisent finalement à

$$\chi(\vec{s}) = \frac{1}{\rho} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}} \left[\frac{x}{\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] \quad (8.49)$$

où $x = k/k_0$.

c - Discussion physique

- La théorie de Bogolubov montre ainsi clairement que

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') \neq \rho_I(\vec{r}) \rho_I(\vec{r}') = \rho^2 \quad (8.50)$$

Elle montre donc l'existence de corrélations spatiales entre les

particules et conduit à une formule analytique pour la transformée de Fourier de l'écart entre ρ_{II} et ρ^2 .

Comportement quand $s = |\vec{r} - \vec{r}'| \rightarrow 0$

Considérons la limite $s \ll \xi_0 = 1/k_0$, de sorte que $x = k/k_0 \gg 1$

On suppose cependant $s \gg a$, car l'expression précédente n'est plus valable pour $s \lesssim a$. Le comportement de $\chi(\vec{s})$ pour s petit est déterminé par le comportement de l'intégrant de (8.49) pour $x \gg 1$. Ecrivons alors

$$\frac{x}{\sqrt{x^2 + 2}} - 1 = \sqrt{1 + \frac{2}{x^2}} - 1 \approx -\frac{1}{x^2} + O\left(\frac{1}{x^4}\right) \quad (8.51)$$

En remplaçant le crochet de l'intégrant de (8.49) par $-1/x^2$, on fait apparaître la transformée de Fourier de $1/s$ et on obtient :

$$\chi(\vec{r} - \vec{r}') \underset{a \ll |\vec{r} - \vec{r}'| \ll \xi_0}{\approx} -\frac{2a}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (8.52)$$

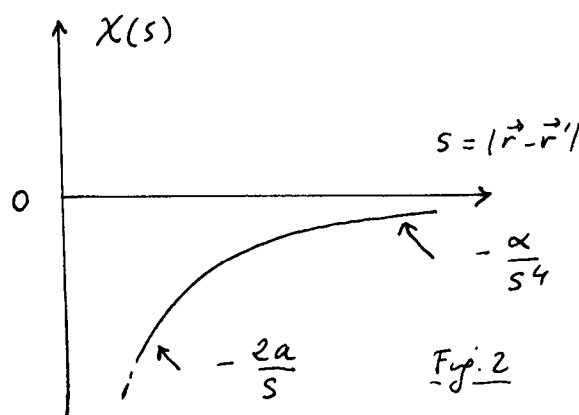
Comportement pour $s \rightarrow \infty$

Après avoir effectué l'intégrale angulaire de (8.49), on tombe sur une intégrale sur $k = |\vec{k}|$. Une série d'intégrations par parties permet alors de montrer que

$$\chi(\vec{r} - \vec{r}') \underset{|\vec{r} - \vec{r}'| \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{\alpha}{|\vec{r} - \vec{r}'|^4} \quad (8.53)$$

où α est un coefficient

Tous ces résultats sont regroupés sur la Figure 2



Références

- [1] - N. Bogolubov, J. Phys. USSR, 11, 23 (1947)
- [2] - K. Huang, Statistical Mechanics, J. Wiley, 1963, chapter 19
- [3] - L. Landau et L. Lifschitz, Physique Statistique, Editions Mir 1967, § 78
- [4] - R. Pathria, Statistical Mechanics, Pergamon, 1972, chapter 11.
- [5] - K. Huang, C. Yang, Phys. Rev. 105, 767 (1957)
- [6] - T.D. Lee, K. Huang, C. Yang, Phys. Rev. 106, 1135 (1957)
- [7] - Y. Castin, Séminaire interne, Groupe atomes froids ENS, Novembre 1995 et calculs non publiés sur le pseudopotentiel.
- [8] - Pour la généralisation de l'approche de Bogolubov à un gaz de bosons inhomogènes (piégés dans un potentiel externe), voir :
A. Fetter, Annals of Physics, 70, 67 (1972)