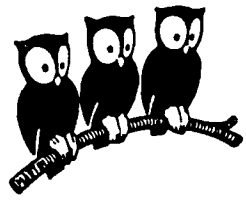
UNIVERSITÉ DE PARIS SUD
U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE



THÈSE

présentée
pour obtenir

le GRADE de DOCTEUR EN SCIENCES
de l'UNIVERSITÉ PARIS XI ORSAY

par

Peter Grüter

Intitulé:

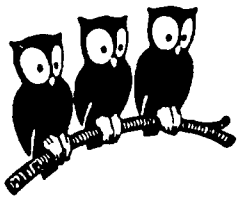
Contribution à la Théorie des Gaz Dilués–Dégénérés

Soutenue le 11 Juillet 1996 devant la Commission d'examen :

M. Roger BALIAN
M. Bernard JANCOVICI
M. Franck LALOË, Directeur de Thèse
M. Maciej LEWENSTEIN, Rapporteur
M. Jacques MAGNEN, Rapporteur

UNIVERSITÉ DE PARIS SUD
U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE



THÈSE

présentée
pour obtenir

le GRADE de DOCTEUR EN SCIENCES
de l'UNIVERSITÉ PARIS XI ORSAY

par

Peter Grüter

Intitulé:

Contribution à la Théorie des Gaz Dilués–Dégénérés

Soutenue le 11 Juillet 1996 devant la Commission d'examen :

M. Roger BALIAN
M. Bernard JANCOVICI
M. Franck LALOË, Directeur de Thèse
M. Maciej LEWENSTEIN, Rapporteur
M. Jacques MAGNEN, Rapporteur

Ade, Paris, du teure Stadt,
Wir müssen heute scheiden,
Ich lasse dich im Überfluß
Von Wonne und von Freuden.
[...]

Heinrich Heine

Meinen Eltern

Remerciements

J'ai été chaleureusement accueilli au Laboratoire Kastler Brossel, ce dont je tiens à remercier ses directeurs successifs, Jacques Dupont-Roc et Michèle Leduc.

Je voudrais témoigner de ma plus grande reconnaissance envers Franck Laloë qui m'a guidé pendant toute la durée de ma thèse par son enthousiasme, sa patience, sa précision et son intuition physique que je n'ai jamais cessé d'admirer.

Des discussions avec Roger Balian, Yvan Castin, David Ceperley, Jacques Dupont-Roc, Werner Krauth, Alexander Meyerovich, William Mullin, Pierre-Jean Nacher, Philippe Nozières et Géneviève Tastevin ont été d'une grande aide et ont fourni des idées stimulantes. Je souhaite leur exprimer toute ma gratitude.

Tous les membres du laboratoire ont contribué aux travaux présentés ici en créant une ambiance amicale et encouragante, si nécessaire pour le bon avancement de ce genre de projet. En particulier, je souhaite en remercier Maxime Ben Dahan, Pierre Desbiolles, Benoît Demolder, Simone Kulin, Eric Stolz, Pippa Storey, Pascal Szriftgiser et Bérengère Villard.

L'équipe informatique du départment, Thierry Besançon, Cécile Combier, et Zaïre Dissi, a joué un rôle important pour l'avancement de mes travaux. Je voudrais ici leur exprimer ma reconnaissance. Je voudrais envoyer un merci particulier à Zaïre et les équipes techniques du département qui ont contribué au maintien de mon vélo en état de marche – afin de permettre le bon avancement des travaux présentés ici – avec de nombreux conseils, des astuces pratiques et une pompe.

Mes remerciements vont à toutes les personnes qui ont accepté de faire partie de mon jury, en particulier Maciej Lewenstein et Jacques Magnen qui ont non seulement accepté le rôle de rapporteur, mais m'ont aussi fait bénéficier de nombreuses remarques.

Enfin mais surtout, je veux remercier Sandrine et ma famille, de leur patience et leur soutien.

Table des matières

1 Les systèmes quantiques dilués **1**

1.1 Situation expérimentale 1

1.2 Approches théoriques 3

1.2.1 Approches inspirées de la matière condensée 3

1.2.2 Pseudopotentiel 4

1.2.3 Les développements en agrégats 6

1.2.4 Motivation de notre travail 8

1.3 Les bases de notre description théorique 9

1.3.1 Généralisation de la formule de Beth-Uhlenbeck 9

1.3.2 Propriétés à courte distance 10

1.3.3 Propriétés thermodynamiques 10

2 La méthode des opérateurs d'Ursell **13**

Introduction au chapitre 13

Article 1 (*en anglais*)

2.1 Introduction 17

2.2 Opérateurs d'Ursell 18

2.3 Diagrammes 21

2.3.1 Définition et comptage 21

2.3.2 Deux sommations 24

2.4 Systèmes dilués dégénérés 27

2.4.1 Gaz parfait 27

2.4.2 Première correction 29

2.4.3 Correction d'ordre suivant 34

2.5 Discussion 38

2.A Règles de construction des diagrammes 40
2.B Deux exemples 42
Fin de l'article
2.6 Condensation de paires, triplets, ... 43
2.6.1 Les classes de la formation de paires 43
2.6.2 Discussion 48
2.6.3 Autres canaux de condensation 48
3 Les opérateurs densité réduits **51**
Introduction au chapitre 51
Article 2 (*en anglais*)
3.1 Introduction 53
3.2 Calcul des opérateurs réduits 54
3.2.1 Opérateur densité à une particule 55
3.2.2 Opérateur densité à deux particules 56
3.3 Application au gaz dilué 57
3.3.1 Gaz parfait 57
3.3.2 Première correction 59
3.3.3 Deuxième ordre en U_2 64
3.3.4 Premier ordre en U_3 66
3.4 Répulsion forte à courte portée 67
3.4.1 Ordre zéro en U_2 68
3.4.2 Premier ordre en U_2 69
3.4.3 Termes suivants 73
3.4.4 Résumé 77
3.5 Discussion 78
3.A Variation du potentiel d'interaction 79
Fin de l'article
3.6 Le cas de formation de paires 82

4 Grandeurs thermodynamiques et longueur d'Ursell **85**

Introduction au chapitre 85

Article 3 (*en anglais*)

4.1 Introduction 87

4.2 Le potentiel de l'ensemble grand-canonique 89

4.2.1 Notation 89

4.2.2 Approximations pour le potentiel thermodynamique 90

4.2.3 Particules sans spin 91

4.2.4 Spins 93

4.2.5 Etats liés 93

4.3 Particules à spin 1/2 95

4.3.1 Densité de particules, énergie, aimantation 96

4.3.2 Discussion 98

4.4 Eléments de matrice de $\overline{U}_2$ 99

4.4.1 Longueur d'Ursell 100

4.4.2 Potentiel en marches 102

4.4.3 Sphères dures 103

4.5 Discussion 108

Fin de l'article

4.6 U_2 pour sphères dures 109

4.6.1 Les fonctions d'onde 111

4.6.2 $[U_2]_{\text{rel}}$ en représentation position 122

4.6.3 $\overline{U}_2$ en représentation impulsion 122

5 Calcul numérique de température critique d'un gaz de bosons **127**

5.1 Les intégrales de chemin 128

5.1.1 L'opérateur densité 129

5.1.2 Symétrisation 134

5.2 Repérage de la transition 134

5.2.1 Densité superfluide 135

5.2.2 Energie libre de torsion 140
5.3 Résultats 141
5.3.1 Le calcul numérique 142
5.3.2 Discussion 143

Conclusion **145**

Appendices

A Lien avec la théorie de Hartree-Fock **147**

B Approche de théorie de champs (Beliaev) **151**
B.1 Fonctions de Green pour des bosons 151
B.2 Règles de Feynman et fonctions de Green 154
B.3 Potentiel effectif 158
B.4 Potentiel de sphères dures 162

C Notations **167**

Bibliographie **171**

Index **176**

Resumé **179**

1. Les systèmes quantiques dilués

LES SYSTÈMES QUANTIQUES DÉGÉNÉRÉS MAIS DILUÉS sont principalement caractérisés par deux propriétés. En premier lieu, ils sont le siège des effets quantiques collectifs, liés à la symétrisation des états des particules et au recouvrement de leurs paquets d'onde; en second lieu, les interactions ne perturbent le système que faiblement en ce sens que les collisions entre particules sont rares, même si, pendant une collision, les particules concernées peuvent sentir un potentiel d'interaction très fort. Ces systèmes physiques se prêtent bien à une étude théorique et il est naturel que les livres d'introduction à la physique statistique en citent des approches théoriques diverses. Ce n'est toutefois que depuis peu de temps que les expérimentateurs ont réussi à en préparer des échantillons.

Les travaux présentés dans cette thèse ont pour objectif d'élaborer des outils théoriques adaptés spécifiquement à l'étude de ce type de système, et ainsi de contribuer à une compréhension plus profonde des phénomènes physiques se produisant dans un domaine qui se trouve à la croisée de la matière condensée et de la physique atomique.

1.1 Situation expérimentale

Un des domaines d'intérêt de la physique atomique est, depuis un certain temps, le refroidissement et le piégeage d'atomes au moyen de faisceaux laser. L'un des buts principaux est d'atteindre des densités et des températures dans un échantillon d'atomes bosoniques conduisant à la *condensation de Bose-Einstein* ([1]; pour une revue récente (1993) des recherches sur ce domaine voir [2]). Cette phase condensée est caractérisée par l'accumulation d'un nombre macroscopique de particules dans l'état de plus basse énergie. Dans les liquides quantiques elle se manifeste par l'effet de superfluidité (cas de ^{4}He) ou de supraconductivité (paires de Cooper formées par les électrons conducteurs des métaux). Mais la densité élevée de tels systèmes rend difficile la séparation des effets quantiques et d'interaction, ce qui explique l'intérêt porté vers les systèmes dilués ou ce problème est moins ardu.

Pour refroidir des atomes, on a recours (le cas échéant seulement pendant une phase de préparation) à une utilisation adéquate des interactions entre atomes et lumière. Le transfert d'impulsion de la lumière vers des atomes a été mise en évidence pour la première fois en 1933 ([3]) dans une expérience qui a permis d'obtenir une *déviation* d'un jet atomique. Le principe des méthodes de *ralentissement* par effet Doppler est le suivant: quand un atome dans son état fondamental est éclairé par un laser se propageant en sens opposé, d'une fréquence légèrement plus faible qu'une fréquence de transition de l'atome vers un état excité, l'atome peut absorber un photon (dont la fréquence apparente est augmentée par l'effet Doppler). La transmission de l'impulsion du photon à l'atome freine ce dernier. Lors de la désexcitation qui suit, le photon est

émis dans une direction arbitraire; donc, en moyenne, ce processus d'émission spontanée ne change pas la vitesse, et le résultat global est que les atomes sont ralentis. Pour des atomes neutres, le *refroidissement*, c'est à dire la diminution du mouvement thermique autour d'une vitesse moyenne, par ce processus a été proposé ([4]) en 1975, mais il a fallu attendre les années 80 pour la première réalisation expérimentale ([5]).

Depuis, les travaux sur le refroidissement laser, en matière expérimentale et théorique, ayant pour but l'obtention des densités de plus en plus élevées, n'ont pas cessé. Au cours des années 1987-88 il est apparu que les températures obtenues par les expériences sur le refroidissement Doppler étaient bien au-dessous de la limite théorique attendue, la température minimale observée étant plutôt donnée par l'énergie de recul dû à l'émission spontanée d'un seul photon. En 1989, une explication en a été donnée en termes d'un effet nouveau, l'*effet Sisyphe* ([6]). La première mise en évidence du refroidissement des atomes en dessous de cette température de recul a été obtenue par la méthode du *Piégeage Cohérent de Population Sélectif en Vitesse* ([7]) en 1988. Le *refroidissement par effet Raman*, une autre méthode permettant de s'affranchir de la limite de la température de recul, a vu le jour en 1992 ([8]).

Pour pouvoir atteindre un régime dégénéré et pour détecter les atomes, il est utile de les confiner dans une région de l'espace à l'aide d'un *piège atomique*. Le premier piège (magnétostatique) pour des atomes neutres a été construit en 1985 par une équipe de chercheurs américains ([9]). La profondeur en énergie du piège étant très faible, ils n'obtenaient cependant qu'une basse densité des particules préalablement refroidies par laser. A partir de 1987 ([10]) l'utilisation du piège magnéto-optique a permis d'atteindre des densités beaucoup plus élévées en utilisant des champs magnétiques qui rendent la force de radiation de la lumière dépendante de la position spatiale.

Il est depuis apparu que les méthodes de piégeage et de refroidissement laser n'étaient pas suffisantes pour obtenir la condensation de Bose-Einstein dans un gaz dilué. Les expérimentateurs se sont alors tournés vers une technique supplémentaire, issue des travaux sur l'hydrogène polarisé : le *refroidissement évaporatif*. Incidemment, c'est entre autres par ce mécanisme que les substances se refroidissent dans la vie courante: la température du thé dans une tasse baisse au cours du temps par la perte des molécules les plus chaudes qui sont emportées par le courant d'air au-dessus de la tasse. Sous l'effet des interactions, la distribution d'énergie des molécules restantes s'ajuste au fur et à mesure, de sorte qu'il y a toujours des particules prêtes à être évaporées dans la queue de haute énergie de la distribution de Maxwell-Boltzmann. L'équipe de refroidissement d'Hydrogène polarisé au MIT a été la première de proposer l'application de ce principe aux atomes piégés ([11, 12]). En raison des difficultés de ces expériences (préparation du H↑, détection etc.), c'est cependant avec des atomes alcalins que cette technique a été complètement couronnée de succès et la condensation de Bose-Einstein observée pour la première fois de façon directe. [1]

1. Cette transition de phase a été observée dans un système analogue, constitué d'un gaz d'excitons, des composés binaires de porteurs de charge positive et négative à l'intérieur des semi-conducteurs excités par une forte radiation laser ([13] (paires d'excitons) et [14]). Cependant, la durée de vie très courte de ces paires empêche des mesures précises sur les effets collectifs dans un état d'équilibre thermodynamique qui ne peut être que métastable.

Pendant le refroidissement évaporatif, la hauteur du potentiel qui sépare l'échantillon d'atomes piégés de l'extérieur est continûment réduite. En pratique, une variante de la méthode utilise un champ de radiofréquence selon une technique proposée par Pritchard que nous ne décrivons pas ici. Les atomes qui se trouvent en haut de la distribution thermique peuvent alors franchir la barrière de potentiel et s'enfuir amenant avec eux plus que l'énergie thermique moyenne par particule. Au cours du temps le niveau de la barrière est abaissé (de manière assez lente pour permettre aux atomes de se rethermaliser, mais aussi assez rapide à cause des pertes du piège) de sorte que la température diminue.

Pour le moment ce sont les groupes travaillant sur le Rubidium ([15]) et le Sodium ([16]) qui ont atteint le régime de condensation de Bose-Einstein. Un certain doute règne encore concernant les expériences avec du Lithium ([17]), la question étant de savoir si la transition a été vraiment atteinte. En revanche, ce cas du lithium présente actuellement un intérêt particulier, du fait que la longueur de diffusion est négative. Ceci pose un problème théorique intéressant de stabilité de l'état condensé (voir par exemple [18] ou [19]).

1.2 Approches théoriques

Nous présentons dans ce mémoire une contribution au traitement théorique des gaz quantiques. Les méthodes habituelles dans ce domaine sont pour la plupart originaires de la physique de la matière condensée, où elles ont été employés avec succès pour la description des liquides quantiques comme ^{3}He ou ^{4}He. Elles sont, bien sûr, également très utiles pour décrire les gaz quantiques; cependant il est possible d'aller au-delà et de développer une comprehension plus microscopique en exploitant le fait que ces systèmes sont dilués.

1.2.1 Approches inspirées de la matière condensée

La *théorie de Landau* ([20: §§1-4,6,25]) fournit une description macroscopique des propriétés des liquides quantiques proche de la température nulle. Elle introduit le concept des *quasi-particules*, qui sont porteuses des excitations élémentaires du système. Ces quasi-particules obéissent à une statistique quantique imposée par les propriétés physiques du système. L'énergie ou toute autre grandeur calculée est donnée par une fonctionnelle de la fonction de distribution des quasi-particules faisant intervenir des constantes d'interaction (les « *constantes de Landau* »). Pour un gaz dilué, ces constantes peuvent être déterminées jusqu'à un certain ordre, à partir de la longueur du diffusion, et cela même pour des potentiels divergents à courte distance (quelquefois appelé « ansatz de renormalisation » de Landau : après avoir fait un calcul habituel de perturbation en potentiel on remplace les expressions – divergentes le cas échéant – en fonction du potentiel par des expressions en fonction des éléments de la matrice de collision T et obtient un résultat fini).

Beliaev et Galitskii ([21–23]) transposent les méthodes de la théorie quantique des champs (électrodynamique quantique) aux problèmes à N corps à température nulle. Pour traiter des potentiels du type de sphères dures, ils resomment toute une classe de

diagrammes de Feynman, du type *échelle*, incluant de cette façon des termes jusqu'à l'ordre infini en puissances de potentiel. Ainsi, ils arrivent à obtenir un développement en termes d'un *potentiel effectif*, lui-même fini, qui représente une amplitude de diffusion généralisée tenant en compte la présence des autres particules. Ce potentiel effectif s'obtient par la solution d'une équation intégrale faisant intervenir les amplitudes de diffusion à deux corps (*on-* et *off-shell*), finies même pour des potentiels fortement répulsifs (voir l'annexe B pour plus de détails).

Des système dilués de bosons à température nulle se décrivent avec une assez bonne approximation par un Hamiltonien modèle qui se laisse diagonaliser par une *transformation de Bogoliubov*, qui remplace les opérateurs création/annihilation agissant sur le condensat par un nombre complexe. On utilise également l'*équation de Gross-Pitaevskii*, une équation de Schrödinger non-linéaire pour la fonction d'onde d'un conensat de Bose-Einstein non-uniforme dans l'espace (la première application en a été la description des vortex dans le ^{4}He superfluide ([24, 25])).

Dans les approches de *champ moyen* chaque particule se déplace dans un potentiel effectif à un corps créé par l'interaction moyennée avec les autres atomes. Cette approximation en termes de particules indépendantes, souvent utilisée par exemple en physique atomique ou nucléaire dans le cadre de l'approximation de *Hartree-Fock*, donne des résultats en bon accord avec les observations pour de nombreux systèmes physiques différents. Dans la pratique, il s'avère difficile de résoudre les équations couplées pour déterminer les fonctions d'onde et le champ moyen de manière autocohérente (voir [26], section 10, et à température finie: sections 27-29).

En ce qui concerne les *méthodes numériques*, le champ est tellement vaste que nous ne citons que quelques exemples, développés notamment pour comprendre la superfluidité de ^{4}He. McMillan a déterminé des énergies et fractions condensées par une approche variationelle ([27]). Kalos, Levesque et Verlet ont utilisé une méthode Monte Carlo pour des fonctions de Green afin d'évaluer des énergies exactes ([28,29]). Nous présentons l'approche des intégrales de chemin déterminées par une méthode de Monte Carlo, mise en œuvre par Ceperley, en plus de détail dans la section 5, dans laquelle nous calculons la température critique des gaz de bosons.

Toutes les manières d'aborder le problème à N corps présentées jusqu'ici ont été élaborées avec un but principal d'application aux liquides. Bien qu'il soit bien sûr possible de les utiliser aussi pour des systèmes gazeux, deux méthodes existent qui sont conçues pour ces cas en particulier et qui tirent profit de la faiblesse de l'interaction faible dès le début du développement. Nous les décrivons plus en détail dans les sections qui suivent.

1.2.2 Pseudopotentiel

Dans une série d'articles ([30–34]), Huang, Lee et Yang reformulent le problème de N particules en interaction faible à l'aide de la notion de « pseudopotentiel », qui ne fait intervenir que les déphasages de collision $\eta_l(k)$. L'idée est de remplacer le potentiel d'interaction par une condition aux limites sur la fonction d'onde, qui par ailleurs se comporte comme celle de particules libres. Provenant initialement de la physique

nucléaire ([35, 36]), ces méthodes se limitaient alors au problème à deux corps et au traitement des collisions dans l'approximation de Born, restrictions que Huang, Lee et Yang ont ensuite surmontées.

Ces auteurs donnent l'expression suivante pour le pseudopotentiel (non-hermitien[2]) associé à un potentiel d'interaction du type de sphères dures de diamètre a :[3]

$$\frac{4\pi\hbar^2}{-mk\cot\eta_0(k)}\delta(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial r}r + \text{termes d'ondes partielles plus élevées} \tag{1.1}$$

Pour que cette théorie reste valable, il faut que la perturbation du potentiel (réel) sur la fonction d'onde reste suffisamment limitée dans l'espace; l'étendue de cette perturbation pourra être assimilée à la largeur infinitésimale d'un pic delta à condition que l'extension spatiale du potentiel soit négligeable par rapport à un paquet d'onde dont la taille est comparable à la longueur de de Broglie, ce qui implique:

$$a/\lambda_T \ll 1 \tag{1.2}$$

(la longueur d'onde thermique λ_T est definie pour des particules de masse m à température T par :

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}} \tag{1.3}$$

où k_B est la constante de Boltzmann)

Appliquant la condition aux limites (1.1) au problème à N particules (tronquée au premier ordre en a), ces auteurs calculent l'énergie de l'état fondamental d'un gaz de bosons jusqu'à l'ordre 3 en a;[4] pour un gaz de fermions ils trouvent la correction à la fonction d'état en ordre 2 et la fonction de corrélation (aux distances entre particules comparables à la portée du potentiel et aux distances très grandes).

Malgré ces résultats, qui sont obtenus d'une façon assez directe, cette théorie présente cependant des limitations inhérentes qui rendent son extension aux ordres suivants difficile. En premier lieu, même si l'expression formelle (1.1) est donnée pour toutes les valeurs de l, en pratique le calcul des contributions des ondes partielles d'ordres supérieurs n'est pas effectué, ce qui se traduit dans la condition suivante pour les moments relatifs k:

$$ka \ll 1 \tag{1.4}$$

2. L'opérateur $(\partial/\partial r)r$ n'est pas hermitique, c'est à dire qu'il existent des fonctions d'onde $\langle\mathbf{r}|\phi\rangle$ et $\langle\mathbf{r}|\theta\rangle$ telles que $\langle\phi \mid (\partial/\partial r)r \mid \theta\rangle \neq \langle\theta \mid (\partial/\partial r)r \mid \phi\rangle$. Même si la façon par laquelle l'opérateur du pseudopotentiel a été obtenu assure que ses valeurs propres sont réelles, son caractère non-hermitien interdit l'utilisation de techniques variationelles afin de déterminer ces valeurs propres ([30]).

3. m est la masse d'une particule, k correspond au vecteur d'onde.

4. Pour des intéraction de sphères dures, on peut développer: $1/[-k\cot\eta_0(k)] = a + \frac{1}{3}(ka)^2a + \ldots$ Dans l'état fondamental non-perturbé, toutes les particules ont un moment cinétique nul de sorte que la contribution en k^2 n'intervient pas. Des collisions dans l'onde $l = 1$ sont interdites par la symmetrie bosonique et ceux de $l > 1$ donnent des termes d'ordre plus élevé.

En second, la méthode n'inclut que des collisions à deux corps; il n'est pas évident de voir comment il serait possible d'en élargir le champ d'application. Enfin, la distorsion de la fonction d'onde à « l'intérieur du potentiel d'interaction » est ignorée.[5] Il est donc possible que des effets physiques soient négligés par le concept même de la théorie du pseudopotentiel.

En fait, c'est cette méthode sous la forme la plus simple, en remplaçant le potentiel d'interaction par le potentiel effectif suivant[6] :

$$V_{\text{eff}} = \frac{4\pi a\hbar^2}{m}\delta(\mathbf{r}) \tag{1.5}$$

qui est habituellement à la base des travaux théoriques sur la condensation de Bose-Einstein dans les gaz atomiques (voir par exemple [18,37,38]).

1.2.3 Les développements en agrégats

Dans la suite nous présentons les méthodes dites de développement en *agrégats* (ou « clusters »). Elles constituent le point de départ des travaux de cette thèse et sont construites pour fournir directement des développements en densité.

Nous nous intéressons aux gaz dilués, c'est à dire aux systèmes pour lesquels la portée du potentiel est beaucoup plus petite que la distance moyenne entre particules:

$$n^{1/3}b \ll 1 \tag{1.6}$$

en introduisant la densité de particules $n = N/\mathcal{V}$ et la longueur b caractérisant la portée du potentiel d'interaction $V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, *i.e.* une distance entre particules à partir de laquelle le potentiel peut être négligé devant les autres énergies du problème. Le produit $n^{1/3}b$ est supposé petit, cas pour lequel il paraît naturel de construire un développement des grandeurs thermodynamiques en puissances de ce paramètre.

Ursell a présenté en 1927 ([39: §5]) une méthode de calcul de la fonction de partition pour un gaz classique qui est basée exactement sur cette idée. Il développe la fonction de partition à l'aide des fonctions $u_{(n)}$ qui sont non-nulles seulement si n particules sont proches l'une de l'autre, autrement dit, si elles forment un *agrégat*. Dans un gaz dilué pourtant les collisions à plus de deux corps sont extrêmement rares et par conséquent le développement peut être arrêté après quelques termes seulement. Mayer et Mayer ont rendu l'approche plus systématique ([40]) et fourni une représentation graphique des termes du développement.

La première généralisation aux systèmes quantiques a été faite par Uhlenbeck et Beth en 1936 ([41, 42]). Ils se limitent au premier ordre (seulement des collisions à deux

5. Bien sûr, cette distorsion est invisible pour des sphères dures, le type de potentiel que Huang, Lee et Yang ont étudié, puisque, dans ce cas, la fonction d'onde est totalement exclue du potentiel.

6. L'omission de l'opérateur $(\partial/\partial r)r$ ne change pas l'effet du pseudopotentiel si celui-ci agit sur des fonctions d'onde qui se comportent regulièrement à l'origine (Contre-exemple: une fonction d'onde qui devient proportionnelle à $a + b/r$ au voisinage de l'origine)

corps interviennent) et aux gaz faiblement dégénérés, pour lesquels la longueur d'onde thermique λ_T est beaucoup plus petite que la distance moyenne entre particules:

$$n^{1/3}\lambda_T \ll 1 \tag{1.7}$$

En effet, le caractère quantique n'intervient que par le fait que les opérateurs associés à l'énergie cinétique et à l'énergie potentielle ne commutent pas, ainsi que par l'utilisation des fonctions d'onde symétrisées pour le calcul des fonctions $u_{(2)}$. La corrélation quantique des deux particules subissant la collision avec toutes les autres est complètement négligée. Ils calculent le deuxième coefficient du viriel $B(T)$, la première correction à la pression après la contribution du gaz parfait pour des systèmes dilués:

$$p = nk_BT\left(1 + B(T)n\lambda_T^3 + C(T)(n\lambda_T^3)^2 + ...\right) \tag{1.8}$$

Dans cette première correction, deux contributions d'origines différentes peuvent être distinguées:

$$B(T) = B_{\text{stat}}(T) + B_{\text{int}}(T) \tag{1.9}$$

Le premier terme est de nature purement statistique; il est de signe opposé pour des bosons et pour des fermions. Le deuxième terme tient compte des effets du potentiel d'interaction. Son calcul fait intervenir la différence entre la densité d'états du système (à deux corps) en interaction et celle du système sans interaction ; cette différence s'exprime en fonction des déphasages de collision $\eta_l(k)$. Beth et Uhlenbeck obtiennent alors le résultat suivant:

$$B_{\text{int}}(T) = -2\sum_l{}' (2l+1)\frac{1}{2\pi^{5/2}}\int_0^\infty \mathrm{d}k\, \mathrm{e}^{-\lambda_T^2 k^2/2\pi}\frac{\mathrm{d}\eta_l}{\mathrm{d}k} + B_{\text{lié}}(T) \tag{1.10}$$

(La somme sur l porte sur les nombres pairs pour des bosons et sur les nombres impairs pour des fermions; $B_{\text{lié}}(T)$ donne la contribution des états liés le cas échéant)

Ce résultat est remarquable en ce sens qu'il exprime de façon exacte une grandeur macroscopique uniquement en fonction des paramètres microscopiques. Pour des particules bosoniques, à basse température, seules les collisions en onde s sont importantes, la somme sur l se réduit alors à un seul terme. L'intégration sur k fait disparaître une puissance de λ_T et introduit – comme $\mathrm{d}\eta_0/\mathrm{d}k$ varie peu comparé à $\mathrm{e}^{-\lambda_T^2 k^2/2\pi}$ – un nouveau paramètre du potentiel, la longueur $a = d\eta_0/dk$ (dans le cas d'un potentiel de sphères dures, a correspond au diamètre des sphères). Par conséquent, le terme $B_{\text{int}}n\lambda_T^3$ est approximativement proportionnel à $na\lambda_T^2$. Le produit $a\lambda_T^2$ correspond donc au paramètre du développement en interaction.

Kahn et Uhlenbeck ont poursuivi ce travail et donné un approche plus méthodique incluant les ordres suivants ([43]). Ils ont également essayé d'appliquer le développement aux gaz parfaits en régime de condensation Bose–Einstein et démontré qu'effectivement le développement mène à une condensation des bosons dans l'état à moment cinétique nul: la pression reste constante pour des densités au-dessus d'un certain seuil critique.

La *méthode de collisions binaires* de Lee et Yang est la continuation de ces études ([44–46] et [47: section 9.7]). Comme nous, ces auteurs cherchent à distinguer deux étapes dans leur étude en introduisant un système auxiliaire de particules discernables. Mais ils effectuent un calcul en termes d'éléments de matrice, et ne font pas le même usage que nous des cycles d'échange. Aussi leur méthode est elle relativement compliquée, en particulier lors qu'ils tiennent approximativement compte d'effets à trois corps et plus (qui sont traités par des intégrations sur la température inverse β). Selon leurs termes, « les propriétés de convergence de leurs développements ne sont pas bien comprises » . Cependant, et comme nous le verrons, ils obtiennent certains resultats qui sont identiques aux nôtres (la formule de Beth Uhlenbeck généralisée), ce dont nous nous sommes d'ailleurs rendu compte après les avoir obtenus independamment. En revanche, dans bien d'autres cas, leurs calculs sont trop compliqués et ne permettent pas d'aboutir à un resultat qui soit comparable aux nôtres.

1.2.4 Motivation de notre travail

Le vaste champ de théories permettant de traiter les systèmes quantiques dilués, dont nous avons seulement pu discuter les plus marquantes, nous fournit des outils théoriques parfaitement satisfaisants, bien que parfois difficiles à mettre en œuvre. Quelles sont alors les motivations de ce travail? Nous limitons cette étude aux gaz quantiques dilués, ce qui est évidemment une simplification par comparaison avec un traitement incluant les liquides. Exploitant cette simplification dès le commencement, nous cherchons à construire une description plus cohérente du système physique, contenant à la fois ses propriétés thermodynamiques macroscopiques (grand potentiel par exemple) et ses propriétés microscopiques (opérateurs densité reduits, à un ou à deux corps). En particulier, les corrélations entre particules sont prises en compte de façon detaillée, même lors qu'elles sont fortes à courte distance sous l'effet de repulsions du type cœur dur. Ce dernier point necessite evidemment un traitement non-perturbatif du potentiel d'interaction. Nous verrons qu'une telle description est effectivement possible en termes d'opérateurs d'Ursell, inspirés des fonctions d'Ursell habituelles en mécanique statistique quantiques, mais mieux adaptés à un cas où le degré de dégénérescence du gaz n'est pas nécessairement faible. Ainsi obtiendrons nous des expressions systématiques du grand potentiel et des opérateurs densité reduits, au sein d'un même cadre théorique.

Ces resultats sont néanmoins limités à un gaz restant au dessus du point de condensation de Bose-Einstein (ou d'appariement BCS pour des fermions). Cependant, nous avons également abordé l'étude de ces phénomènes de condensation; en particulier nous montrons comment le formalisme des opérateurs d'Ursell permet très directement de mettre en évidence le phénomène de condensation BCS, par une généralisation toute naturelle de la condensation de bosons. De même d'autres « canaux de condensation » d'objets plus complexes apparaissent de façon systématique.

Nous nous sommes aussi intéressé au problème de condensation superfluide dans un gaz de bosons. Guidés par le formalisme des opérateurs d'Ursell, nous avons obtenu certains resultats numériques concernant la température critique. Cependant, faute de temps, l'étude des gaz condensés n'a pas été complétée de façon aussi systématique et nos resultats n'ont pas encore le même caractère méthodique qu'au dessus du point de condensation.

L'ensemble de notre travail est décrit dans la suite de ce mémoire.

1.3 Les bases de notre description théorique

Notre but est donc de pousser l'idée du développpement en agrégats plus loin que dans les traitement classiques (fonction d'Ursell). Ceux-ci requièrent deux conditions de validité, (1.6) et (1.7), alors que nous désirons nous affranchir de la seconde.

1.3.1 Généralisation de la formule de Beth-Uhlenbeck

La formule de Beth-Uhlenbeck, qui donne le deuxième coefficient du viriel d'un gaz non-dégénéré, peut être généralisée à des dégrées de dégénérescence plus élévés. L'élaboration et la description de ce formalisme, que nous avons baptisée « *Méthode des opérateurs d'Ursell* », fait l'objet du chapitre 2.

La méthode se base sur des opérateurs agissant sur un système auxiliaire de particules discernables, que nous appelons les « opérateurs d'Ursell », et qui permettent de développer la fonction de partition en une série où le paramètre de développpement fait intervenir la portée du potentiel, mais pas son intensité (il reste convergent même pour des potentiels fortement répulsifs). Le premier opérateur d'Ursell agit sur une particule, et tient compte de l'énergie cinétique ainsi que, le cas échéant, d'un potentiel extérieur; le deuxième, opérant sur deux particules, contient tous les effets du potentiel pendant une collision binaire, le troisième ceux des collisions à trois particules et ainsi de suite.

Les opérateurs tenant en compte les interactions (les opérateurs d'ordre supérieur à 1) font intervenir non seulement les effets asymptotiques des collisions sur les fonctions d'onde (déphasages), mais aussi leur comportement à courte distance qui joue un rôle dans les corrélations entre particules. En utilisant les opérateurs d'Ursell, nous classons les effets du potentiel selon le nombre de particules mises en jeu dans les collisions, ce qui nous permet de trouver des approximations propices à l'étude des systèmes dilués.

Ce traitement des interactions est suivi d'une deuxième opération – indépendante – qui tient compte de la symétrisation quantique. Nous exprimons les opérateurs symétriseur/antisymétriseur en cycles d'échange. Après un regroupement des termes nous parvenons à resommer sur ces cycles d'une façon exacte, ce qui nous permet de traiter des systèmes de dégénérescence élevée. Afin de systématiser les sommations et approximations à effectuer, nous introduisons une représentation graphique.

Des expressions compactes des différentes corrections à la fonction de partition du

gaz parfait sont obtenues de cette manière. Il est possible de choisir l'approximation à employer en fonction du problème à étudier de sorte qu'on peut se concentrer sur les effets importants. La première correction est valable pour un gaz dilué et généralise la formule de Beth-Uhlenbeck en introduisant des facteurs d'occupation de l'espace des impulsions. D'autres corrections, par exemple d'ordre plus élévé en portée du potentiel, ou des sommations permettant de reproduire l'appariement des paires de Cooper, sont calculées.

1.3.2 Propriétés à courte distance

Les éléments de matrice diagonaux des opérateurs de densité réduits à un (ou deux corps) donnent la probabilité pour qu'une (respectivement deux) parmi un grand nombre de particules d'un ensemble thermodynamique se trouvent dans des états quantiques spécifiés. Ils permettent ainsi de sonder le système à une échelle microscopique. Dans le cadre de notre formalisme nous obtenons les opérateurs densité en imposant une variation aux opérateurs d'Ursell à un corps de l'expression de la fonction de partition. De cette façon, nous obtenons ces opérateurs dans les approximations successives, partant à l'ordre le plus bas de l'expression valable pour le gaz parfait (voir chapitre 3).

La première correction s'applique aux gaz dilués. Pour la calculer, nous prenons comme point de départ la formule de la fonction de partition du premier ordre en portée du potentiel. Nous obtenons une expression pour l'opérateur à un corps qui fait intervenir la trace sur une deuxième particule liés avec le premier par un opérateur d'Ursell à deux corps, et qui ressemble donc à un résultat des méthodes de champ moyen. Dans le terme correctif de l'opérateur à deux particules, deux parties sont à distinguer: la première contient également une trace sur une particule auxiliaire qui introduit une contribution d'interaction moyennée; dans la seconde, en revanche, les deux particules ressentent directement l'interaction par un opérateur d'Ursell à deux corps. Cette partie contient toutes les corrélations qui sont importantes à courte distance, lorsque le champ moyen créé par les particules autour cesse d'être prédominant.

Comme une première application nous déterminons la fonction de corrélation à deux corps pour un gaz de sphères dures. En tenons compte des diagrammes jusqu'à l'ordre deux en portée du potentiel, nous vérifions qu'en effet la probabilité de trouver deux particules à une distance inférieure au diamètre des sphères dures s'annule. C'est à notre connaissance la première fois qu'une expression générale de cette propriété non-perturbative est obtenue.

1.3.3 Propriétés thermodynamiques

Le chapitre 4 décrit les résultats que nous avons obtenus pour les différentes grandeurs thermodynamiques utilisant le premier terme de notre développement. Les traces sont explicitées en intégrales sur les états d'onde libre, plus une somme des contributions dues aux états liés. Quelques grandeurs, comme par exemple la pression, la densité ou la susceptibilité magnétique, sont explicitées en fonction d'opérateurs d'Ursell à deux corps, décomposés selon les ondes partielles.

Les expressions obtenues ressemblent à celles évaluées au premier ordre des méthodes habituelles de perturbation en potentiel, la différence principale étant que, dans toutes les expressions, les éléments de matrice du potentiel d'interaction sont remplacés par un opérateur d'Ursell à deux particules (qui lui-même contient tous les ordres en potentiel). Il est alors important d'étudier le comportement de cet opérateur. A titre d'exemple nous comparons les éléments de matrice de cet opérateur pour un gaz de sphères dures avec des prédictions de la théorie des pseudopotentiels (dans l'approximation de (1.5)). Il se trouve que pour des bosons, dans le domaine de validité des pseudopotentiels (1.2) et (1.4), on n'observe pas de différence appréciable entre les deux résultats, tandis qu'un phénomène étonnant se produit pour les fermions, du fait de l'existence de la sphère de Fermi qui introduit une nouvelle échelle d'énergie: pour des moments cinétiques k de l'ordre du moment de Fermi k_F, l'élément de matrice de l'opérateur d'Ursell change de signe, tout comme si les interactions pourraient devenir attractives à température suffisamment basse.

Les expressions sont exactes au premier ordre dans le « paramètre de dilution » $n^{1/3}b$ pourvu que le degré de dégénérescence, fixé par le produit $n^{1/3}\lambda_T$, ne soit pas trop élevé; elles cessent d'être valable si les particules commencent à atteindre le régime de condensation de Bose-Einstein ou de paires de fermions. En effet, quand on se rapproche de la température critique, les termes de notre développement commencent à diverger et cela d'autant plus rapidement que les termes sont d'ordre élevé.

Au chapitre 5 nous exposons les resultats d'une étude de la condensation de Bose-Einstein obtenus par une méthode numérique.

2. La méthode des opérateurs d'Ursell

Introduction au chapitre

LA FONCTION DE PARTITION est une fonction génératrice qui contient toute l'information d'un ensemble thermodynamique ([48: 7.1,3]). Dans ce chapitre nous montrons comment on peut calculer cette fonction pour un système dilué à l'aide du formalisme des opérateurs d'Ursell. La fonction de partition $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ de l'ensemble grand-canonique est donnée par :

$$\mathcal{Z}_{\text{gc}} = \text{Trace} \left\{ \begin{matrix} S_N \\ A_N \end{matrix} z^N \mathrm{e}^{-\beta \mathfrak{H}_N} \begin{matrix} S_N \\ A_N \end{matrix} \right\} \tag{2.1}$$

Dans cette formule, la trace s'effectue sur le nombre de particules N et les états des particules discernables, β désigne la « température inverse » $(k_B T)^{-1}$, z la fugacité $\mathrm{e}^{\beta\mu}$ où μ est le potentiel chimique, et $\mathfrak{H}_N$ l'hamiltonien pour N particules interagissant par un potentiel V_{int} :

$$\mathfrak{H}_N = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j}^{N} V_{\text{int}}(i,j) \tag{2.2}$$

Le symétriseur S_N s'applique pour des particules bosoniques, l'antisymétriseur A_N pour des fermions.

Comme nous l'avons déja dit, nous calculons $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ en deux étapes. Dans un premier temps, les interactions sont traitées pour un système auxiliaire de particules discernables en se servant d'un développement en agrégats inspirée des méthodes citées dans la section 1.2.3, puis la statistique entre en jeu et les symétriseurs/antisymétriseurs sont développés en cycles d'échange C_l. Cette démarche est à opposer aux calculs antérieurs, où les effets d'interaction et de statistique sont incorporés dans un seul traitement, ce qui rend plus difficile la prise en compte d'un taux de dégénérescence élevé puisqu'elle demanderait la resommation d'un très grand nombre de coefficients du viriel.

L'élaboration et la description précise de cette démarche fait l'objet d'un article publié ([49]) que nous reproduisons dans la suite. Ici, nous ne donnons qu'un résumé simplifié.

Afin de développer l'exponentielle de l'hamiltonien dans (2.1),

$$K_N(1,...,N) = e^{-\beta \mathfrak{H}_N(1,...,N)} \tag{2.3}$$

on définit une hiérarchie d'opérateurs d'« Ursell » U_q, dont les premiers membres s'écrivent :

$$\begin{aligned} U_1(1) &= K_1(1) \\ U_2(1,2) &= K_2(1,2) - U_1(1)U_1(2) \\ U_3(1,2,3) &= K_3(1,2,3) - [U_2(1,2)U_1(3) + \text{permutations}] \\ &\quad -U_1(1)U_1(2)U_1(3) \end{aligned} \tag{2.4}$$

Pour un potentiel qui tend suffisamment vite vers zéro quand la distance entre particules croit, ces opérateurs transposent dans le domaine quantique la propriété de l'« agrégativité » (« clustering » en anglais) des fonctions d'Ursell classiques : leurs élements de matrice s'annulent en représentation positions lorsque les particules sont éloignées l'une de l'autre. En termes des U_q l'opérateur K_N s'exprime par :

$$K_N(1,...,N) = \sum_{\{U\}} \underbrace{U_1(\cdot)\dots U_1(\cdot)}_{m'_1 \text{ facteurs}} \times \underbrace{U_2(\cdot,\cdot)\dots U_2(\cdot,\cdot)}_{m'_2 \text{ facteurs}} \times U_3(\cdot,\cdot,\cdot) \times \dots \tag{2.5}$$

Chaque terme de la somme est un produit de m'_1 opérateurs U_1, de m'_2 opérateurs U_2, ..., et ainsi de suite. La sommation, schématisée par $\sum_{\{U\}}$, consiste en une somme sur toutes les différents ensembles $\{m'_1, m'_2, \dots, m'_N\}$ conformes avec la condition :

$$\sum_{q=1}^{N} q\, m'_q = N \tag{2.6}$$

et toutes les possibilités non-équivalentes de distribuer les N particules dans les arguments des U_q.

On remarque que, même pour des potentiels divergents (potentiels atomiques à courte distance entre particules par exemple), aucun des termes de (2.5) ne présente un comportement singulier, ce qui est à opposer aux développements habituels en puissances du potentiel.

De façon analogue le symétriseur/antisymétriseur de (2.1) est développé en cycles d'échange :

$$\begin{matrix} S_N \\ A_N \end{matrix}(1,...,N) = \frac{1}{N!} \sum_{\{C\}} \underbrace{C_1(\cdot)\dots C_1(\cdot)}_{m_1 \text{ facteurs}} \times \eta^{m_2} \underbrace{C_2(\cdot,\cdot)\dots C_2(\cdot,\cdot)}_{m_2 \text{ facteurs}} \times C_3(\cdot,\cdot,\cdot) \times \dots \tag{2.7}$$

Pour le symétriseur S_N (bosons) le facteur η vaut $+1$, pour l'antisymétriseur A_N (fermions), η prend la valeur -1. La somme symbolique sur $\{C\}$ porte également sur les configurations possibles, à condition d'adapter la notion de non-équivalence de deux distributions.[1]

1. Les cycles d'échange sont invariant uniquement par rotation cyclique des arguments, alors que toutes les permutations sont permises dans les U_q.

En regroupant les particules liées par des opérateurs U_q ou des cycles d'échange C_l (ou les deux) en « agrégats » et en factorisant les contributions des agrégats à la trace de (2.1) en $\Gamma_{\text{agrégat}}(\cdot,\cdot,\ldots,\cdot)$, nous obtenons la fonction de partition $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ sous la forme :

$$\mathcal{Z}_{\text{gc}} = \sum_{N=1}^{\infty} z^N \frac{1}{N!} \sum_{\{C\}} \sum_{\{U\}} \prod_{\text{agrégat}} \Gamma_{\text{agrégat}}(\{\text{particules de l'agrégat}\}) \tag{2.8}$$

Si l'on remarque que des termes, qui ne diffèrent que par la numérotation des particules, donnent la même contribution, de sorte que seule la structure des agrégats intervient dans le calcul, il est possible d'exprimer le logarithme de la fonction de partition par :

$$\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}} = \sum_{\text{diag}} z^{n_{\text{diag}}} \mathfrak{f}_{\text{diag}} \Gamma_{\text{diag}} \tag{2.9}$$

Dans cette formule nous sommons sur tous les *diagrammes*, c'est à dire toutes les structures d'agrégats possibles. La structure d'un agrégat décrit donc la façon dont les particules sont liées par l'intermédiaire des opérateur U_q ou C_l. Par exemple, la contribution du diagramme le plus simple est donnée par $\Gamma_1 = \text{Trace}_1\{U_1(1)C_1(1)\}$, les deux diagrammes incluant deux particules apportent $\text{Trace}_{1,2}\{U_2(1,2)C_1(1)C_1(2)\}$ et $\text{Trace}_{1,2}\{U_1(1)U_1(1)\,\eta\,C_2(1,2)\}$.[2] Le nombre entier n_{diag} compte le nombre de particule dans le diagramme, $\mathfrak{f}_{\text{diag}}$ est le facteur de comptage, qui donne le poids de chaque diagramme dans la somme d'origine (2.8). Pour rendre plus parlants les calculs et les approximations à faire, les diagrammes sont visualisés par une représentation graphique. La détermination des facteurs de comptage depend de la définition exacte des diagrammes. Nous avons choisi nos conventions d'equivalences de diagrammes afin que les sommations des séries qui interviennent dans la suite soient plus simples à effectuer. Ces conventions sont détaillées dans l'annexe 2.A.

Il s'avère que certaines *classes* de diagrammes sont faciles à regrouper, car ils ne se distinguent que par la longueur des cycles d'échange. En termes des contributions Ξ_{classe} des classes, la fonction de partition devient :

$$\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}} = \sum_{\text{classe}} \Xi_{\text{classe}} \tag{2.10}$$

Chaque contribution Ξ_{classe} est extensive; la forme précédente de $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ se prête donc bien à faire des approximations. En effet, selon le problème physique à étudier, seules quelques classes sont retenues dans la somme de (2.10). La classe la plus simple contient tous les termes du gaz parfait (absence d'interaction). Dans ce cas, tous les éléments de matrice des opérateurs d'Ursell d'ordre supérieur à 1 sont nuls. En appliquant des relations de fermeture, on redémontre le résultat bein connu :

$$\Xi_{\text{gaz parfait}} = -\eta\text{Trace}\{\text{Log}[1 - \eta z U_1]\} \tag{2.11}$$

2. Il n'y a pas de terme $\text{Trace}_{1,2}\{U_1(1)U_1(1)\,C_1(1)C_1(2)\}$ car cette somme peut être factorisée et se trouve déjà incluse dans le terme proportionel à Γ_1.

Ensuite viennent les classes pertinentes pour un gaz dilué (exactement un opérateur U_2 uniquement, mais un nombre arbitraire d'opérateurs U_1) qui fournissent la première correction à la contribution du gaz parfait et donnent un résultat généralisant le résultat de Beth et Uhlenbeck (1.10) aux gaz plus dégénérés :

$$\Xi_{(1\times U_2)} = z^2 \mathrm{Trace}_{1,2} \left\{ \begin{matrix} S_2 \\ A_2 \end{matrix} U_2(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \right\} \tag{2.12}$$

où f est l'opérateur défini par :

$$f = \frac{zU_1}{1-\eta z U_1} \tag{2.13}$$

et qui – pour un gaz parfait – correspondrait à la fonction de distribution à une particule, puisque les élements de matrice diagonaux sont donnés par :

$$\langle \mathbf{k} \mid f \mid \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\hbar^2 k^2/2m-\mu)} - 1} \tag{2.14}$$

En remplaçant les facteurs $[1+\eta f]$ dans (2.12) par 1, leur valeur dans le cas non-dégénéré, nous retrouvons la formule de Beth-Uhlenbeck. Contrairement au cas des gaz non-dégénérés nous n'avons pas réussi à réduire (2.12) à une quadrature de déphasages de collisions.

Les corrections d'ordre suivant en portée du potentiel (diagrammes contenant deux opérateur U_2 ou un opérateur U_3) sont :

$$\begin{aligned} \Xi_{(2\times U_2)} = \frac{z^4}{2}\mathrm{Trace}_{1,2} &\left\{ \left[U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \right]^2 \right\} \\ &+ 2\eta z^4 \mathrm{Trace}_{1,2,3} \left\{ U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \right. \\ &\left. \times\, U_2^{S,A}(1,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(3)] \right\} \end{aligned} \tag{2.15}$$

et :

$$\Xi_{(1\times U_3)} = z^3 \mathrm{Trace}_{1,2,3} \left\{ U_3^{S,A}(1,2,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)] \right\} \tag{2.16}$$

Dans ces expressions $U_q^{S,A}$ est la version (anti)symétrisé de l'opérateur d'Ursell U_q :

$$U_q^{S,A}(1,\ldots,q) = \begin{matrix} S_q \\ A_q \end{matrix}(1,\ldots,q)\, U_q(1,\ldots,q) \begin{matrix} S_q \\ A_q \end{matrix}(1,\ldots,q) \tag{2.17}$$

Le fait que seuls des diagrammes d'une forme déterminée interviennent pour un problème physique donné est un avantage de ce procédé : nous verrons par exemple comment il est possible de resommer les classes qui engendrent l'effet d'appariement BCS, d'obtenir une expression compacte de leur correction à $\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$ et ensuite chercher le comportement critique.

On trouvera plus de détails dans la reproduction[3] qui suit d'un article publié en anglais ([49]) :

Ursell operators in statistical physics I: Generalizing the Beth Uhlenbeck formula.

2.1 Introduction

The Beth Uhlenbeck formula ([41, 42, 50]) gives an exact expression of the second virial coefficient as a function of all collision phase shifts associated with the interaction potential. This is a remarkable result which, in a concise formula including no phenomenological constant, relates macroscopic and microscopic quantities: on one hand the density, the temperature, and the pressure of a gas, on the other the quantum phase shifts, which are exactly calculable from the Schrödinger equation. A closer inspection shows that the pressure correction is the sum of two contributions, one of pure statistics, and a second arising from the interactions; the former is actually nothing but the first order term of the expansion in $n\lambda^3$ of the ideal gas equation of state (n is the number density and λ the thermal wavelength). It is therefore not surprising that the validity of the formula should require two conditions, that the gas be dilute with respect to both degeneracy effects ($n\lambda^3 \ll 1$) and interaction effects as well ($nb^3 \ll 1$, where b is the range of the interaction potential). A natural question is whether one can release the first of these conditions and study gaseous systems over a larger range, going continuously from the classical region where $n\lambda^3 \ll 1$ to the quantum region where this quantity is comparable to one. One would just assume that the gas remains always dilute in terms of the interactions. As a matter of fact, most classical textbooks on quantum statistical mechanics include a study of gaseous systems that are degenerate and imperfect. The methods they use are based on various forms of perturbation theory; for instance they introduce an auxiliary pseudopotential which replaces the real interaction potential [48: 10.5], or they make a direct substitution of a collision T matrix for this potential [51], or use variational methods [52]. These approaches are, nevertheless, different from that of Beth and Uhlenbeck whose calculation is exact (of course they limit the calculation to the first density correction to the equation of state, but this is precisely the definition of the second virial correction). In essence, the cluster expansion method they use is a method providing directly density expansions, as opposed to interaction expansions, which require at least partial resummations of diagrams in powers of the interaction potential [23] to reconstruct the T matrix from V and to obtain density expansions. Actually, the exact treatment of the relative motion of two particles is explicit in the Beth Uhlenbeck formula, which contains a thermal exponential of the two particle hamiltonian ensuring that thermal equilibrium has been reached, in other words that the binary correlations between the particles are treated properly. Technically, a characteristic of this approach is that no expression which diverges for repulsive hard cores is ever written, even at some intermediate stage. It therefore seems to be an attractive possibility to try and extend the method to degenerate systems, if only to compare the result of both methods, interaction and density

3. Seulement des changements d'ordre typographique ont été apportés

expansions. This is the subject of the present article; we show that concise and exact formulas can indeed be written that provide a natural generalization of the Beth Uhlenbeck formula, without requiring complicated algebra.

For this purpose, we will make use of a generalization of the quantum Ursell[4] cluster functions introduced initially by Kahn and Uhlenbeck [43]: Ursell operators which intrinsically do not contain statistics (as opposed to the usual quantum Ursell functions [47, 53], which are fully symmetrized). The action of the operators is defined, not only in the space of symmetric or antisymmetric states of the real system, but also in the larger space of an auxiliary system of distinguishable particles. If the system is dilute in terms of the interactions but not of statistics, this makes it possible to limit the calculation to low order Ursell operators while, with the usual (fully symmetrized) Ursell functions, one would need to include higher and higher orders with increasing degeneracy[5]. Of course, this method implies that we have to give up well-known advantages of the formalism of second quantization, but this is the price to pay for the treatment of interactions and statistics in completely independent steps. It also means that an explicit symmetrization of the wave functions becomes indispensable at some point and, moreover, that no approximation whatsoever can be made at this step: otherwise the possibility of treating strongly degenerate systems would be lost. Fortunately it turns out that the symmetrization operation can indeed be performed exactly. This is done by introducing simple products of operators, corresponding to exchange cycles, or more generally simple functions of operators (fractions) that correspond to summations over the size of these cycles up to infinity. Physically, this allows to emphasize the role of the size of exchange cycles[54] that take place in a physical system of identical particles and shows, in each situation, which size is dominant in the determination of its properties, pressure for instance.

Another feature of the method is that it naturally provides expressions for the one and two body density operators, which is of course convenient if one is interested in a detailed study of correlations. Also, the formalism can be applied to other physical problems, such as the Bose Einstein condensation. These questions will be the subject of coming articles; a preliminary report on this work has been given in [54].

2.2 Ursell operators

In the canonical ensemble, the partition function Z_N of a system of indistinguishable particles is given by a trace inside the space of symmetrical (or antisymmetrical) states. Nevertheless, with the help of the projectors S and A onto these (sub)spaces, the trace can be extended to a larger space, which is associated with the same number of distinguishable particles:

$$Z_N = \text{Trace} \left\{ K_N \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} \right\} \tag{2.18}$$

[4]The initial introduction of the Ursell functions was made by him within classical statistical mechanics [39], and generalized ten years later to quantum mechanics by Kahn and Uhlenbeck.

[5]As discussed in [54], when a Bose Einstein condensation takes place, the Ursell operators have no singular variation, which is another way to see that they are not sensitive to degeneracy by themselves.

In this equation, S applies for bosons while A applies for fermions, and the operators K_N are defined by:

$$\begin{array}{lcl} K_1 & = & \exp -\beta \mathfrak{H}_1(1) \\ K_2 & = & \exp -\beta \left[\mathfrak{H}_1(1) + \mathfrak{H}_1(2) + V_{12}\right] \\ .... & ... & .... \\ K_N & = & \exp -\beta \left[\sum_{i=1}^{N} \mathfrak{H}_1(i) + \sum_{i>j} V_{ij}\right] \end{array} \tag{2.19}$$

with usual notation: $\mathfrak{H}_1(1)$ is the one particle hamiltonian including kinetic energy and an external potential (if there is any in the problem), V_{ij} is the interaction potential between particles with labels i and j. We now use cluster techniques to expand operators exactly in the same way as one usually does for functions. The Ursell operators U_l (with $l = 1, 2, ..N$) are therefore defined according to:

$$\begin{array}{lcl} U_1 & = & K_1 \\ U_2(1,2) & = & K_2(1,2) - K_1(1)K_1(2) \\ U_3(1,2,3) & = & K_3(1,2,3) - K_2(1,2)K_1(3) - K_2(2,3)K_1(1) \\ & & -K_2(3,1)K_1(2) + 2K_1(1)K_2(2)K_1(3) \end{array} \tag{2.20}$$

etc. Conversely, in terms of the Ursell operators, the N particle operator K_N can be written in the form:

$$K_N = \sum_{\{m_l'\}} \sum_{\{D'\}} \underbrace{U_1(.)U_1(.)...U_1(.)}_{m_1' \text{ factors}} \times \underbrace{U_2(.,.)U_2(.,.)...U_2(.,.)}_{m_2' \text{ factors}} \times U_3(.,.,.) .... \tag{2.21}$$

where the first summation is made on all possible ways to decompose the number of particles as:

$$N = \sum_l l m_l' \tag{2.22}$$

The second summation correspond to all non-equivalent[6] ways to distribute the N particles into the variables of the Ursell operators, symbolized by dots in (2.21). It is convenient to simplify the two summations into one:

$$\sum_{\{m_i'\}} \sum_{\{D'\}} \Longrightarrow \sum_{\{U\}} \tag{2.23}$$

which is meant over all non-equivalent ways to distribute the particles into various sequences of U's. There is little difference between our definitions and those of section 4.2 of [53] or [55]: we use operators instead of symmetrized functions and, more importantly, the action of these operators are defined, not only within the state space that is appropriate for bosons or fermions, but also in the larger space obtained by tensor

[6]For instance $U_2(1,2)U_3(3,4,5)$ and $U_2(2,1)U_3(4,3,5)$ correspond to equivalent distributions of 5 particles, since the very definition of the Ursell operators implies that the order inside each U_k is irrelevant.

product that occurs for distinguishable particles. Hence the need for an explicit inclusion of S or A in (2.18).

We now decompose these operators into a sum of permutations P_α that, in turn, we decompose into independent cycles C of particles[7]:

$$\begin{matrix} S \\ A \end{matrix} = \frac{1}{N!} \sum_{\{m_i\}} \sum_{\{D\}} \underbrace{C_1(.)C_1(.)C_1(.)}_{m_1 \text{ factors}} \times \eta^{m_2} \underbrace{C_2(.,.)C_2(.,.)C_2(.,.)}_{m_2 \text{ factors}} \times C_3(.,.,.)....$$

(2.24)

where the first summation is similar to that of (2.21), while the second corresponds to all non-equivalent[8] ways to distribute numbers ranging from one to N into the variables of the various C's. In this equation, the operator S applies for bosons with $\eta = +1$, while A with $\eta = -1$ applies for fermions. We also simplify the notation into:

$$\sum_{\{m_i\}} \sum_{\{D\}} \Longrightarrow \sum_{\{P_\alpha\}} \tag{2.25}$$

We can now insert (2.21) and (2.24) into (2.18) and obtain, within a double summation, numbers that are traces calculated in the space of distinguishable particles, i.e. in the ordinary tensor product of N single particle state spaces. Inside most of the terms of the summation, factorization into traces taken inside smaller subspaces occur. For instance, if the term in question contains particle number i contained at the same time in a U_1 operator as well as in a C_1, the contribution of that particle completely separates by introducing the simple number Trace $\{U_1\}$. Or, if n particles are all in the same U_n but all in separate C_1's, this group of particles contributes by a factor $\text{Trace}_{1..n}\{U_n\}$; if they are all in different U_1's but also contained in one single large cycle C_n, their contribution also factorizes separately. More generally, in each term of the double summation, particles group into clusters (U-C clusters), which associate together all particles that are linked either[9] by cycles C_l (with $l > 1$) or by Ursell operators $U_{l'}$ (with $l' > 1$). The general term is therefore the product of the contributions of all the clusters that it contains and one can write:

$$Z_N = \frac{1}{N!} \sum_{\{P_\alpha\}} \sum_{\{U\}} \prod_{\text{cluster}} \Gamma_{\text{cluster}}(i, j, k, ..) \tag{2.26}$$

[7]We use the same notation as in ref.[54]: $C_k(i, j, k, ..)$ denotes a cycle where particle i replaces particle j, particle j replaces particle k, etc. This should not be confused with the notation $P(i, j, k, ...)$ for a general permutation (not necessarily a cycle) where particle i replaces particle 1, particle j particle 2, particle k particle 3, etc. Any P can be decomposed into a product of C's; for instance, $P(2, 1, 3) = C_2(1, 2)C_1(3)$.

[8]Inside every cycle, a circular permutation of the variables has no effect and therefore does not affect the permutation P_α.

[9]There are therefore two explicitly distinct origins to the clustering of particles in this point of view: belonging to the same $U_{l'}$ or to the same cycle C_l. This is distinct from usual cluster theories where, either only interactions introduce clustering (as in classical statistical mechanics), or the two origins are not explicitely distinguished (as in usual quantum cluster theory).

where $(i, j, k, ..)$ is the index number of particles contained inside the cluster; the number of clusters into which each term of the double summation is factorized depends, in general, on this particular term.

2.3 Diagrams

Clusters differing only by the numbering of particles that they contain give the same contribution. It is therefore useful to reason in terms of diagrams (U-C diagrams), which emphasize the way particles are connected through exchange cycles and Ursell operators, rather than their numbering. For instance, the first diagram will correspond to one particle in a U_1 and in a C_1 (whatever the numbering of the particle is), and contribute the value Trace $\{U_1\}$ as mentioned above; another diagram will introduce the value $\text{Trace}_{1,2}\{U_2\}$, etc.; in this section we discuss more generally how diagrams can be defined in a convenient way.

2.3.1 Definition and counting

The value of any diagram containing n_{diag} particles can be written as a trace over the variables of n_{diag} particles numbered arbitrarily:

$$\Gamma_{\text{diag}} = \eta^{p_2+p_4+\cdots}\text{Trace}_{1,2,..n_{\text{diag}}}\{U_1(1)\times \\ \times..U_1(r_1)U_2(r_1+1,r_1+2)...C_1(i)...C_1(j)C_2(l,s)...\} \quad (2.27)$$

Here p_k is the number of cycles[10] of length k; the factor $\eta^{p_2+p_4+\cdots}$ arises from the factors η's in (2.24) and corresponds to the contribution of the parity of the permutations contained in the diagram to the total permutation of the N particles. Now, inside each term of the multiple summation, a given diagram Γ_{diag} may occur several times; we then note m_{diag} the number of times it is repeated, and we get:

$$Z_N = \frac{1}{N!}\sum_{\{P_\alpha\}}\sum_{\{U\}}\prod_{\text{diag}}[\Gamma_{\text{diag}}]^{m_{\text{diag}}} \quad (2.28)$$

with the obvious relation:

$$N = \sum_{\text{diag}} m_{\text{diag}} \times n_{\text{diag}} \quad (2.29)$$

Of course identical diagrams appear, not only in the same term of the double summation, but also in many different terms. Therefore, if $\sum_{\{m_{\text{diag}}\}}$ symbolizes a summation over all possible ways to decompose N according to (2.29), we can also write:

$$Z_N = \frac{1}{N!}\sum_{\{m_{\text{diag}}\}} c\{m_{\text{diag}}\} \times \prod_{\text{diag}}[\Gamma_{\text{diag}}]^{m_{\text{diag}}} \quad (2.30)$$

[10] One obviously has: $p_1 + 2p_2 + ... = n_{diag}$.

where $c\{m_{\text{diag}}\}$ is the numbers of terms in the double summation of (2.28) that correspond to this particular decomposition of N.

To evaluate this number, we have to specify more precisely how the U-C diagrams are constructed. In every cluster, we represent the permutation cycles C_k by horizontal lines containing k boxes, or segments, which are available to numbered particles. When the corresponding particles are inside U_1's, we do not add anything to the diagram; when they are contained inside U_2's, we join the corresponding segments by an additional double line, a triple line for U_3's, etc. For instance, if we consider the pure exchange cluster:

$$\Gamma_{\text{cluster}} = \text{Trace}_{1,2,..,7}\{U_1(1)U_1(2)..U_1(7)C_7(1,2,....7)\} \tag{2.31}$$

the corresponding diagram will be that of figure 2.1(a). This kind of linear diagram is the only possibility for an ideal gas; to generate a Γ_{cluster} appearing in (2.26), it must receive a numbered particle in the first segment of the line, in the second the particle which is replaced by it under the effect of the permutation cycle, in the third the particle which is replaced by that in the second segment, etc. Equation (2.31) gives what we will call the "explicit value" of the contribution of the diagram; using simple transformations (see ref.[54] or section 2.4.1), one can obtain the simpler "reduced value" $\text{Trace}_1\{[U_1(1)]^7\}$.

If we now start from a cluster which contains one single U_2:

$$\Gamma_{\text{cluster}} = \text{Trace}_{1,2,...9}\{U_2(1,2)U_1(3)U_1(4)U_1(5)..U_1(9)C_3(1,3,4)C_6(2,5,...9)\} \tag{2.32}$$

we obtain the diagram shown in figure 2.1(b); in the same way, the cluster:

$$\Gamma_{\text{cluster}} = \text{Trace}_{1,2,...10}\{U_2(1,6)U_1(2)U_1(3)..U_1(5)U_1(7)...U_1(10)C_{10}(1,2,3,.,6,..10)\} \tag{2.33}$$

leads to the diagram of fig. 2.1(c). These two kinds of diagrams turn out to be the only ones that are necessary to generalize the Beth Uhlenbeck formula; we give their reduced values in section 2.4.2. Fig. 2.1(d) shows an example of a diagram containing one single U_3, and arising from the trace:

$$\Gamma = \text{Trace}_{1,2,...,16}\{U_3(1,2,3)U_1(4)U_1(5)..U_1(16)C_3(1,4,5)C_8(2,6..12)C_5(3,..16)\} \tag{2.34}$$

and figure 2.1(e) gives another similar example. Clearly, the process can be generalized to associate a diagram to any cluster, however large and complex.

But it is not sufficient to construct diagrams, we must also choose explicit rules[11] ensuring that every Γ_{cluster} appearing in (2.26), where the particles are still numbered, will correspond to one single, well defined, diagram; for instance, for the cluster written in (2.32), we must decide whether the diagram will be that shown in figure 1-b

[11] There is some flexibility in this choice, and here we attempt to take the most convenient convention, but it is not necessarily the only possiblity.

or another where the lowest cycle ("base cycle") is that of length 6 instead of 3. We will avoid this kind of ambiguity by choosing rules which fix, for every cluster associated with a given diagram, where exactly each numbered particle should fall into the diagram. These rules ensure that no double counting of clusters may occur; they also determine how the geometrical characteristics of the diagrams (the lengths of the successive cycles) can be varied, which in turn determines the way in which the summations over lengths will be made in a second step (next section). For our purposes in this article, we do not need to study the most general case (this discussion is given in appendix 2.A); it will be sufficient to remember that the first particle in the lowest cycle ("base cycle") must be, among all particles contained in the U_l of highest order l, that which has the lowest index number for the configuration to be correct.

The preceding rules also introduce the "counting factors" corresponding to the probability of obtaining a correct representation of a cluster by throwing numbered particles at random into a diagram; the counting factors are used below to obtain the value of $c\{m_{\text{diag}}\}$. Suppose for instance that we distribute k numbered particles into a linear diagram of the kind shown in fig. 2.1(a) in all possible ways; it is clear that there is a probability $1/k$ that the first particles will have the lowest index number as required, which leads to the following counting factor $\mathfrak{f}_{\text{diag}}$ for pure exchange cycles:

$$\mathfrak{f}_{\text{diag}} = \frac{1}{k} \tag{2.35}$$

(in other words, if one puts numbered particles into a cycle $C_k(.,.,.,..)$, one can obtain the same permutation k different times). Similarly, it is easy to see that the counting factors of the diagrams of figures 2.1-(b) and (c) are $1/2$, which corresponds to the probability of having the particle numbers contained inside the single U_2 in the correct order. The general value of counting factors is given in appendix 2.A; in many practical situations (when case (ii) of this Appendix does not occur) we can ignore the g's in formula (2.84) and use the simpler form:

$$\mathfrak{f}_{\text{diag}} = [p_{l_M} \times l_M]^{-1} \tag{2.36}$$

where l_M is the largest order of the Ursell operator contained in the diagram (one for fig. 2.1(a), two for figs. (b) and (c), three for figs. 2.1(d) and (e) while p_{l_M} is the number of these Ursell operators in this particular diagram (7 for fig. 2.1(a), one for all the other cases in this figure). Two other examples of diagrams for which this formula is valid are given in figure 2.2; as an illustration, they are explicitly calculated in appendix 2.B.

We are now in position to calculate $c\{m_{\text{diag}}\}$. This number can be obtained by distributing the N particles inside the sites of all the diagrams of a series defined by the m's, which can be done in $N!$ different ways, and counting how many times the same term of the double summation of (2.28) is obtained. Since there are $m_{\text{diag}}!$ ways to interchange the order of all U-C clusters arising from the same diagram, there is a first redundancy factor equal to $\prod_{\text{diag}} (m_{\text{diag}}!)$ that comes in. Moreover, there is also only a proportion $(\mathfrak{f}_{\text{diag}})^{m_{\text{diag}}}$ of the obtained configurations that is acceptable. Altogether, the

Figure 2.1 (*on opposite page*): Examples of U-C diagrams

For an ideal gas, only linear U-C diagrams containing chains of one particle Ursell operators U_1 occur, as shown in (a); a summation of the contribution of these diagrams over the length of the chain gives the grand potential (multiplied by $-\beta$). The generalization of the Beth Uhlenbeck formula arises from the diagrams shown in (b) and (c) containing one single two body Ursell operator U_2; for each of them, a summation over the lengths of the U_1 chains is also necessary. Figure (d) shows an example of a diagram containing a three body U_3 operator and three U_1 chains, with a counting factor $g = 2$. Figure (e) shows an example of multiple connection through an U_3 operator, which also introduces a factor $g = 2$ in the weight of the diagram. For more details on the definition and counting of the diagrams, see 2.A

net result is:

$$c\{m_{\text{diag}}\} = N! \prod_{\text{diag}} \frac{1}{m_{\text{diag}}!} [\mathfrak{f}_{\text{diag}}]^{m_{\text{diag}}} \tag{2.37}$$

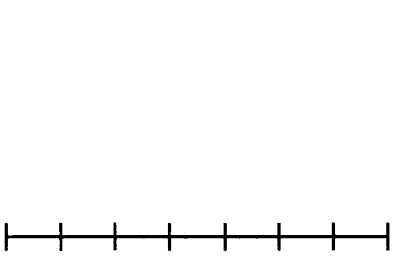
2.3.2 Two summations

We now take advantage of the fact that (2.37) contains factorials and, in a second step, that the value of $\mathfrak{f}_{\text{diag}}$ depends on the topology of the diagrams, but not of the size of the chains of U_1's that it contains (except for pure exchange cycles). This allows us to group together series of terms in (2.30). The first summation is done classically by going to the grand canonical ensemble and defining the corresponding partition function by:

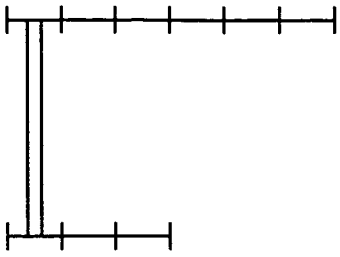
$$\mathcal{Z}_{\text{gc}} = \sum_N \mathrm{e}^{\beta\mu N} Z_N \tag{2.38}$$

Then a useful simplification occurs because the sums over the m_{diag}'s are now independent; moreover the factors $\mathrm{e}^{\beta\mu N}$ can be reconstructed by multiplying every number Γ_{diag} by $\mathrm{e}^{\beta\mu n_{\text{diag}}}$, so that:

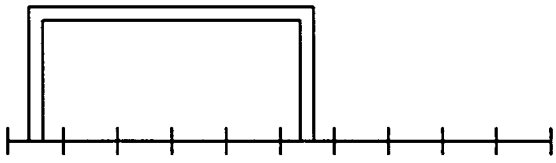
$$\mathcal{Z}_{\text{gc}} = \prod_{\text{diag}} \exp\left[\exp\left(\beta\mu n_{\text{diag}}\right) \times \mathfrak{f}_{\text{diag}} \times \Gamma_{\text{diag}}\right] \tag{2.39}$$



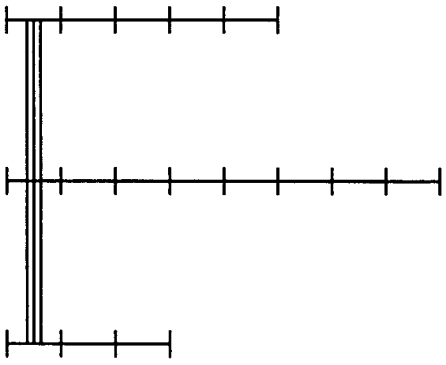
(a)



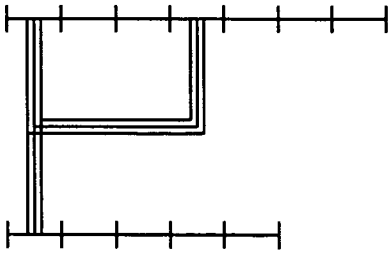
(b)



(c)



(d)



(e)

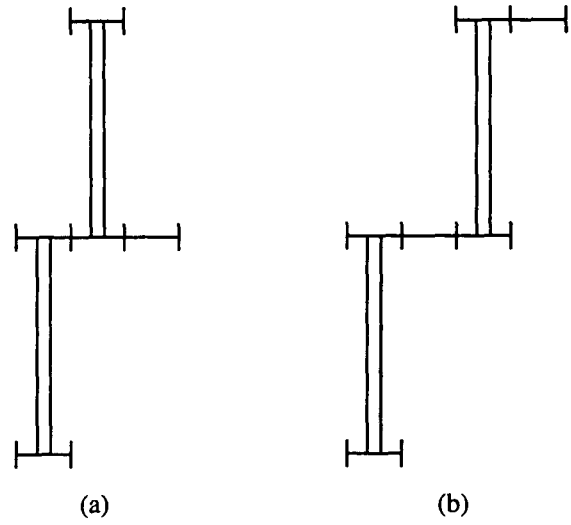


Figure 2.2: Other examples of U-C diagrams

As in figure 2.1, horizontal lines correspond to exchange cycles containing U_1 operators; vertical double lines symbolize U_2 operators (triple lines would be used for U_3, etc.). Formula (2.36) gives the weight of these diagrams; a more explicit calculation of these two terms is given in 2.B.

We therefore obtain the grand potential $\Omega = F - \mu N$ (F denotes the free energy) in the form:

$$-\beta\Omega = \mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}} = \sum_{\mathrm{diag}} \mathrm{e}^{\beta\mu n_{\mathrm{diag}}} \times \mathfrak{f}_{\mathrm{diag}} \times \Gamma_{\mathrm{diag}} \tag{2.40}$$

This is an exact formula, which gives the value of the pressure of the system (multiplied by its volume and divided by the temperature).

The second summation which can now be done consists in grouping together the contributions of all U-C diagrams that have the same "frame" (or "skeleton"): we sum the diagrams which have the same topology and differ only, inside the horizontal lines that represent the permutation cycles, by the lengths of the intermediate chains of U_1's that connect together the particles contained in the U_l's with $l > 1$. Beside the fact that this operation turns out to be mathematically simple - it merely leads to the introduction of fractions of the operator U_1 as we will see in the next section (see also the discussion of §2 of ref. [54]) -, it is also indispensable from a physical point of view: we have to make a summation over all lengths of intermediate horizontal chains of U_1's in order to take into account an arbitrary degree of degeneracy. We call "classes" these groups of topologically equivalent U-C diagrams; classes may also be represented by diagrams (Ξ-diagrams) which are, in a sense, simpler than the original diagrams since any indication of the length of the cycles has been removed. Examples are shown in figure 2.3 where dashed lines mean that a summation over cycle length is implied. We call Ξ_{class} the contribution of a class; because the counting factors $\mathfrak{f}_{\mathrm{diag}}$ are equal for

all diagrams of the same class[12], one can write:

$$\Xi_{\text{class}} = f_{\text{class}} \sum_{\text{diag} \in \text{class}} e^{\beta\mu n_{\text{diag}}} \times \Gamma_{\text{diag}} \tag{2.41}$$

In terms of classes, (2.40) becomes:

$$\text{Log}\, \mathcal{Z}_{\text{gc}} = \sum_{\text{class}} \Xi_{\text{class}} \tag{2.42}$$

As (2.40), this is an exact formula, containing extensive quantities in both sides, and thus well adapted to approximations (as opposed to $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ itself). We will see below that the first term of the summation gives the grand potential[13] of an ideal, (degenerate), gas, which we shall note Ξ_{ideal}. The generalized Beth Uhlenbeck formula is contained in the second and the third term in the summation, which we shall note Ξ^1_{direct} and Ξ^1_{exch}; if, moreover, in each of these two classes, one limits the summation of (2.41) to its first term (lowest order in U_1), one recovers the usual formula, valid only for weakly degenerate gases.

2.4 Dilute degenerate systems

2.4.1 Ideal gas

We first check that the first class of diagrams reconstructs the grand potential (multiplied by $-\beta$) of the ideal gas. This class, symbolized in figure 2.3(a), corresponds to the summation of the contribution of pure exchange cycles containing only U_1's, summed over any length k ranging from one to infinity. We know from (2.35) the counting factor, so that we just need to calculate the numerical contribution Γ_k of every cycle. The result, proved below, is simple:

$$\Gamma_k = \eta^{k+1}\, \text{Trace} \left\{ [U_1]^k \right\} \tag{2.43}$$

where:

$$\eta = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{for bosons} \\ -1 & \text{for fermions} \end{array} \right\} \tag{2.44}$$

This is again a consequence of the fact that the trace over the N particles contained in the diagram is taken in a space that is simply the tensor product of k single particle spaces of state. Because the numbering of the particles does not affect the value of Γ_k (it just changes the names of dummy variables), we can for convenience renumber the relevant particles from 1 to k. The effect of C_k is then to move particle 1 into the place initially occupied by particle 2, particle 2 into the place occupied by particle 3,

[12] Except for the ideal gas, which is a special case.

[13] More precisely, the logarithms of partition functions give the value of the grand potential multiplied by $-\beta$.

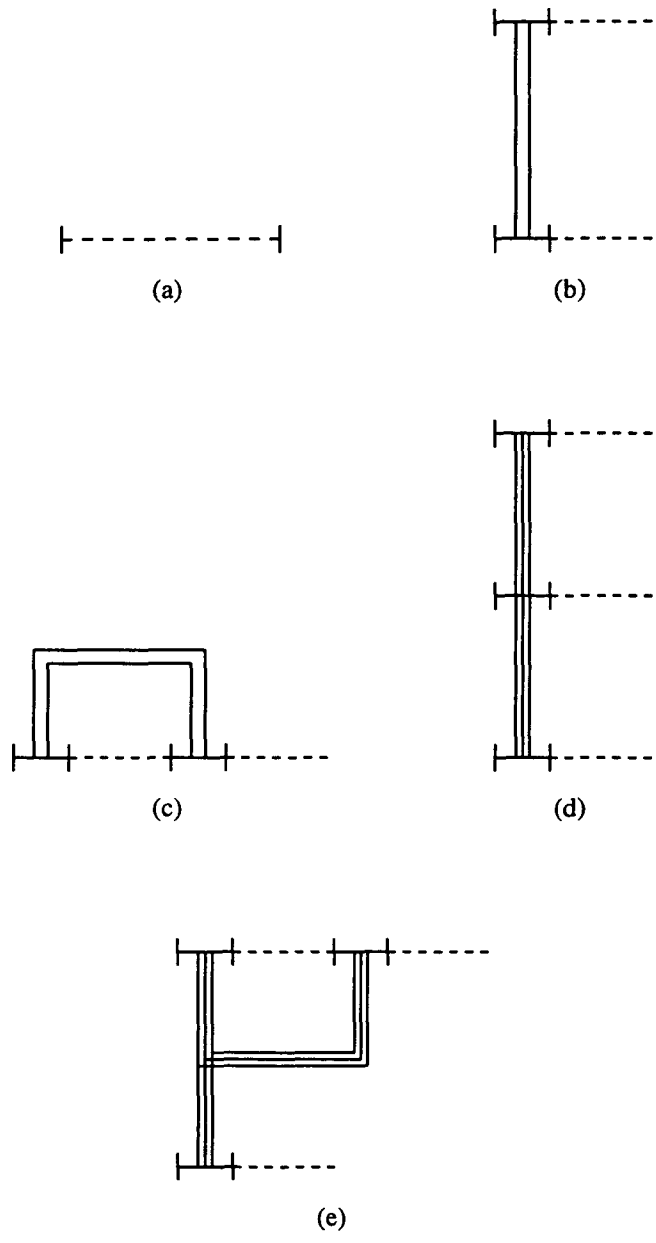


Figure 2.3: Ξ diagrams

Ξ diagrams introduced by the summation of the diagrams of figure 2.1 over the lengths of the U_1 chains, according to formula (2.41). The dashed lines, which symbolize these summations, can be replaced by intermediate operators given by fractions $1/[1-\eta z U_1]$, where $z = \exp \beta\mu$; every operator U_l, with $l \geq 2$, remains explicit and, moreover, introduces a factor z^l; finally, the weights f_{diag} must also be inserted in the value of the Ξ diagram.

and so on until one comes back to the place of particle 1. Introducing a complete set of states $\{| \varphi_n >\}$ in the one particle space of states[14], one can then write:

$$\Gamma_k = \eta^{k+1} \sum_{n_1,n_2,\ldots n_k} < 1 : \varphi_{n_1} \mid U_1(1) \mid 1 : \varphi_{n_2} >< 2 : \varphi_{n_2} \mid U_1(2) \mid 2 : \varphi_{n_3} > \times \\ \times \ldots . \times < k : \varphi_{n_k} \mid U_1(k) \mid k : \varphi_{n_1} > = \eta^{k+1} \, \mathrm{Tr} \left\{ [U_1]^k \right\} \tag{2.45}$$

(the factor η^{k+1} is equal to the parity of the cycle which enters in the definition of A for fermions). We now have to make the summation:

$$\Xi_{\text{ideal}} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \mathrm{e}^{\beta\mu k} \Gamma_k = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \mathrm{e}^{\beta\mu k} \eta^{k+1} \, \mathrm{Trace} \left\{ [U_1]^k \right\} \tag{2.46}$$

which contains a well known series:

$$x + \eta \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \eta \frac{x^4}{4} + \ldots = -\eta \, \mathrm{Log} \left[1 - \eta x \right] \tag{2.47}$$

We therefore get for the grand potential (multiplied by $-\beta$) of the ideal gas:

$$\Xi_{\text{ideal}} = -\eta \mathrm{Trace} \left\{ \mathrm{Log} \left[1 - \eta e^{\beta\mu} \, U_1 \right] \right\} \tag{2.48}$$

This is the classical result. For instance, we can assume that $\mathfrak{H}_0$, the one-particle hamiltonian, is equal to $P^2/2m$ (kinetic energy of a particle in a box); by replacing in (2.48) the trace by a sum over d^3k, and U_1 by its diagonal element $\mathrm{e}^{-\beta\hbar^2k^2/2m}$, one immediately recovers usual formulas that are found in most textbooks on statistical mechanics. Indeed, the method that we have used is more indirect than the traditional method, but it gives a physical interpretation to the term in $[U_1]^k$ that is obtained by expanding the logarithmic function of (2.48): it corresponds to the contribution of all possible cyclic exchanges of k particles in the system.

2.4.2 First correction for short range potentials

Correction to the partition function

What happens now if we add the two following terms in (2.42), which contain one single U_2 and no Ursell operator of higher order ? Let us start with the first class of diagrams, shown in fig. 3-b where the two particles in the U_2 operator belong to two different exchange cycles, and which we will call direct diagrams. In the first diagram of this class, the two cycles are of length $k = 1$ (identities) and only two particles, unaffected by exchange, are involved; this simply introduces the contribution:

$$\Gamma_{11} = \mathrm{Trace}_{1,2} \left\{ U_2(1,2) \right\} \tag{2.49}$$

[14] If the particles have internal states, the index n symbolizes at the same time the orbital quantum numbers as well as those characterizing the internal state. For instance, it the particles have spin I, a summation written as $\sum_n$ contains in fact two summations, one over orbital quantum numbers, and a second over $(2I + 1)$ spin states.

The next diagram in this class corresponds to three clustered particles, two contained in the same U_2 and two in one permutation operator C_2. The numerical value of this second diagram is:

$$\Gamma_{2,1} = \eta \mathrm{Trace}_{1,2,3} \{U_2(1,2)U_1(3)C_2(1,3)C_1(2)\} = \eta \mathrm{Trace}_{1,2,3} \{U_2(1,2)U_1(3)P_{ex}(1,3)\} \quad (2.50)$$

or:

$$\Gamma_{2,1} = \eta \sum_{n_1,n_2,n_3} < 1 : \varphi_{n_1} |< 2 : \varphi_{n_2} \mid U_2(1,2) \mid 1 : \varphi_{n_3} >| 2 : \varphi_{n_2} >< \varphi_{n_3} \mid U_1 \mid \varphi_{n_1} > \quad (2.51)$$

which provides the following reduced value:

$$\Gamma_{2,1} = \eta \mathrm{Trace}_{1,2} \{U_2(1,2)U_1(1)\} \quad (2.52)$$

Similarly, one would calculate a contribution $\Gamma_{1,2}$ arising from the exchange of particles 2 and 3, and obtained by replacing in (2.52) $U_1(1)$ by $U_1(2)$. More generally, when a U_2 operator clusters together k_1 particles, belonging to the same permutation cycle of length k_1, with k_2 particles belonging to another cycle of length k_2, the calculation of the effect of each of these cycles remains very similar to that of section 2.4.1: now we have two particles that separately exchange with others, but the algebra of operators remains the same for each of them. We therefore get the reduced value:

$$\Gamma_{k_1,k_2} = \eta^{k_1-1}\eta^{k_2-1}\mathrm{Trace}_{1,2} \left\{U_2(1,2) [U_1(1)]^{k_1-1} [U_1(2)]^{k_2-1}\right\} \quad (2.53)$$

For this class of diagrams, according to (2.36) the counting factor f is simply $1/2$. The last step is to make a summation over all possible values of k_1 and k_2 after inserting an exponential of β times the chemical potential multiplied by the number of particles contained in the diagram:

$$\Xi_{\mathrm{direct}} = \frac{1}{2} \sum_{k_1,k_2} e^{\beta\mu(k_1+k_2)}\Gamma_{k_1,k_2} \quad (2.54)$$

This operation can be done by using the relation:

$$\sum_{k=1}^{\infty} (\eta x)^{k-1} = \frac{1}{1-\eta x} \quad (2.55)$$

One therefore introduces fractions of the U_1's operators, which results in the expression:

$$\Xi^1_{\mathrm{direct}} = \frac{1}{2}\mathrm{Trace}_{1,2} \left\{U_2(1,2) \frac{e^{\beta\mu}}{1-\eta e^{\beta\mu}U_1(1)} \frac{e^{\beta\mu}}{1-\eta e^{\beta\mu}U_1(2)}\right\} \quad (2.56)$$

For the second class of diagrams, exchange diagrams shown in figure 3-c, the two particles contained in U_2 are intermixed inside the same circular permutation. The first exchange diagram corresponds to the two particles contained in the same transposition:

$$\Gamma^{\text{ex.}}_{1,1} = \text{Trace}_{1,2}\{U_2(1,2)\eta C_2(1,2)\} = \eta\text{Trace}_{1,2}\{U_2(1,2)P_{\text{ex.}}\} \tag{2.57}$$

The second contains three particles:

$$\Gamma^{\text{ex.}}_{1,2} = \text{Trace}_{1,2,3}\{U_2(1,2)U_1(3)C_3(1,2,3)\} \tag{2.58}$$

which is equal to:

$$\Gamma^{\text{ex}}_{1,2} = \sum_{n_1,n_2,n_3} < 1:\varphi_{n_1} |< 2:\varphi_{n_2} \mid U_2(1,2) \mid 1:\varphi_{n_2} >| 2:\varphi_{n_3} >< \varphi_{n_3} \mid U_1 \mid 1:\varphi_{n_1} > \tag{2.59}$$

Now, we can use the equality:

$$\langle 1:\varphi_{n_1} \mid \langle 2:\varphi_{n_2} \mid U_2(1,2) \mid 1:\varphi_{n_2}\rangle \mid 2:\varphi_{n_3}\rangle = \langle 1:\varphi_{n_1} \mid \langle 2:\varphi_{n_2} \mid U_2(1,2)P_{\text{ex}} \mid 1:\varphi_{n_3}\rangle \mid 2:\varphi_{n_2}\rangle \tag{2.60}$$

which allows us to get the same summation over indices as in equation (2.51) and to obtain the reduced value:

$$\Gamma^{\text{ex}}_{1,2} = \text{Trace}_{1,2}\{U_2(1,2)P_{\text{ex}}U_1(1)\} \tag{2.61}$$

Another, very similar, term occurs if the circular permutation $C_3(1,2,3)$ of (2.58) is replaced by $C_3(1,3,2)$; the calculation can easily be repeated and provides the result:

$$\Gamma^{\text{ex}}_{2,1} = \text{Trace}_{1,2}\{U_2(1,2)P_{\text{ex}}U_1(2)\} \tag{2.62}$$

From the preceding equations it is not difficult to see that the generic term of this second class of diagrams is obtained from (2.53) by a simple replacement of U_2 by the product $\eta U_2 P_{\text{ex}}$. Inserting a P_{ex} into (2.56) therefore provides $\Xi^1_{\text{exch.}}$ Finally, the value of the grand potential (multiplied by $-\beta$), to first order in U_2, is given by:

$$\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}} = \Xi_{\text{ideal}} + \text{Trace}_{1,2}\left\{e^{2\beta\mu}U_2(1,2)\frac{[1+\eta P_{\text{ex}}]}{2}\frac{1}{1-\eta e^{\beta\mu}U_1(1)}\frac{1}{1-\eta e^{\beta\mu}U_1(2)}\right\} \tag{2.63}$$

This result is valid within an approximation which is basically a second virial treatment of the interactions, while it contains all statistical corrections. The formula remains therefore valid if the degree of degeneracy of the gas is significant. Nevertheless, as pointed out for instance in section 2.1 of ref. [56] and in ref. [57], virial series (even summed to infinity) are no longer appropriate beyond values where the density exceeds that of a phase transition; this is because singularities in the thermodynamic quantities occur at a transition (in the limit of infinite systems). Therefore, for bosons, the validity of (2.63) is limited to non condensed systems. The discussion of what happens when a Bose Einstein condensation takes place will be given in a future article

Comparison with the usual Beth Uhlenbeck formula.

We now show that equation (2.63) reduces to the Beth Uhlenbeck formula if the two denominators containing U_1's are replaced by one, an operation which is valid in the limit of low densities where $e^{\beta\mu}$ is small. To see the equivalence between the low density limit of relation (2.63) with the usual value of the second virial correction, we start from the definition of the W_k functions given in equation (14.35) of reference [53], which for $k = 2$ becomes[15]:

$$W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2\,(\lambda_T)^6 \sum_{n_s} \mid \Psi_{n_s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mid^2 e^{-\beta E_{n_s}} \tag{2.64}$$

where the functions $\Psi_{n_s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ are a complete set of stationary states for the system of identical particles (they are properly symmetrized); the thermal wavelength is defined by:

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \tag{2.65}$$

Relation (2.64) can be transformed into:

$$W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2\,(\lambda_T)^6 \langle 1 : \mathbf{r}_1, 2 : \mathbf{r}_2 \mid \sum_{n_s} \mid \Psi_{n_s}\rangle\langle\Psi_{n_s} \mid e^{-\beta H} \mid 1 : \mathbf{r}_1, 2 : \mathbf{r}_2\rangle \tag{2.66}$$

Inside this equation appears a closure summation over the symmetrized states of the system so that:

$$W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2\,(\lambda_T)^6 \langle 1 : \mathbf{r}_1, 2 : \mathbf{r}_2 \mid S e^{-\beta \mathfrak{H}} \mid 1 : \mathbf{r}_1, 2 : \mathbf{r}_2\rangle \tag{2.67}$$

(for fermions, S is replaced by A). From this function ref. [53] defines the Ursell function $U_2^H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ by:

$$U_2^H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - W_1(\mathbf{r}_1) W_1(\mathbf{r}_2) = \Delta W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + U_2^{\text{ideal gas}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tag{2.68}$$

where $\Delta W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ is the difference between the values of $W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ with and without interaction potential, and $U_2^{\text{ideal gas}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ the value of the Ursell function for a system of two free particles. Equation (10.49)[16] of [53] shows that the second virial coefficient in the expansion of the grand potential is half of the integral of $U_2^H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ over the variables $\mathbf{r}_1$ and $\mathbf{r}_2$, multiplied by $(\lambda_T)^{-3}$ and the inverse of the volume. But the contribution of $U_2^{\text{ideal gas}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ is automatically contained in Log $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$, so that we can concentrate on $\Delta W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ only. Because the summation over $\mathbf{r}_1$ and $\mathbf{r}_2$ can be written as a trace in a space which is the tensor product of two one particle state spaces, and because:

$$S, A = \frac{1}{2}[1 \pm P_{\text{ex}}] \tag{2.69}$$

[15] We assume for simplicity that the particles have no internal state (or, if they do, that they are all in the same internal state).

[16] In the first edition, this equation is numbered (14.49).

we get the result:

$$\int \mathrm{d}^3 r_1 \, \mathrm{d}^3 r_2 \, \Delta W_2^V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2\,(\lambda_T)^6 \, \mathrm{Trace}_{1,2} \left\{ U_2(1,2) \frac{[1 + \eta P_{\mathrm{ex}}]}{2} \right\} \tag{2.70}$$

where $U_2(1,2)$ is the difference between the exponentials of the interacting particle hamiltonian minus that of free particles, which is precisely our definition (2.20). We therefore recover our result (2.63), provided the denominators $1 - \eta e^{\beta\mu} U_1$ inside the trace are replaced by one.

Discussion

The only difference between equation (2.63) and the Beth Uhlenbeck formula arises from the presence of the two fractions inside the trace. Since:

$$\frac{1}{1 - \eta e^{\beta\mu} U_1} = 1 + \eta \frac{e^{\beta\mu} U_1}{1 - \eta e^{\beta\mu} U_1} \tag{2.71}$$

they are actually nothing but operatorial forms of the usual Fermi or Bose factors $(1 + \eta f)$ that appear, for instance, in the collision term of the Uehling Uhlenbeck or Landau kinetic equation (with the usual notation f for the distribution function). In the present case, nevertheless, because U_2 and U_1 do not commute in general, the operatorial character of the fractions is relevant: in the absence of external potential (mutually interacting particles in a box), the eigenvectors of U_1 are plane waves[17], while those of U_2 are different since they involve correlations between the particles.

If the trace in the right hand side of (2.63) is calculated in the basis of plane waves, the correction is expressed as an integral containing the diagonal elements of U_2 between such plane waves. The simplest situation occurs when all these diagonal elements have the same sign. Then, for bosons, because the eigenvalues of the fractions are larger than 1, the effect of degeneracy is always to enhance the effects of interactions; this is physically satisfying since the Bose Einstein statistics tends to favor situations where particles are close. In particular, if the potential is attractive and if there are two body bound states (molecules), their weight will be increased with respect to what is would be in the usual Beth Uhlenbeck formula. If, on the other hand, the diagonal elements of U_2 between plane waves change sign when the relative momentum of the two particles changes, which may happen if the potential has attractive as well as repulsive parts, more complicated cancellation effects may take place in both the usual Beth Uhlenbeck formula and its generalization, so that no general prediction on the sign of the effect of degeneracy is possible (except for the contribution of bound states of bosons which remains enhanced as above).

For fermions, the eigenvalues of the fractions are between 0 and 1 so that the effect of statistics are just the opposite of what they are for bosons: they tend to reduce the

[17] If the particles are subject to the effect of an external potential (atoms in a trap for instance), the eigenvectors of U_1 are not simple plane waves, but the essence of our analysis remains valid.

effects of the interactions, except if mutual cancellation effects take place. Moreover, if the system is strongly degenerate, the effect of the product of the two fractions is to cancel the contribution of all matrix elements corresponding to particles inside the Fermi sphere, leaving only interactions between particles near the surface (or outside) of the Fermi sphere. This applies to bound molecules, which introduce a contribution containing the scalar product of the bound state wave function by all plane waves outside of the Fermi sphere, exactly as in the Cooper problem.

A final remark is related to the convergence of the power series that we have summed into fractions of the U_1 operators (the remark applies for fermions only). As noted by Kahn and Uhlenbeck [43], when the chemical potential of a system of fermions becomes positive, the virial series diverge, and the equation of state is obtained by a continuation of a an analytic function. Here we observe the same phenomenon: the series in $\left[e^{\beta\mu}U_1\right]^k$ that we have summed over the size k of the exchange cycles becomes divergent when $\mu > 0$; nevertheless the sum remains a regular function and, for fermions, (2.63) has no singularity.

2.4.3 Next order correction

We now calculate further corrections to the partition function by including all diagrams containing two U_2 operators as well as those containing a single U_3 (and, of course, an arbitrary number of U_1 operators connected together by exchange cycles). We call their respective contributions to the logarithm of the partition function $\Xi_{(2\times U_2)}$ and $\Xi_{(1\times U_3)}$; the corresponding diagrams are shown in figures 2.4 and 2.5.

Diagrams containing two U_2's

As shown in figure 2.4, there are altogether ten diagrams containing two U_2's; we note that, although for instance the diagrams (a) and (b) in this figure are topologically equivalent, they should indeed be considered as distinct; this is because the location of the starting point corresponding to the "base particle" (with our convention, that in the lowest left corner) is relevant according to our definition of diagrams; in the former the "base cycle" involves another U_2 operator, while in the second one it is the second exchange cycle which connects two U_2's. The corresponding rules are explicitly given in appendix 2.A, section (i).

The "reduced" contributions of these diagrams are relatively easy to calculate by using rules which can be inferred[18] from the calculations of the preceding section: (i) each extra exchange cycle (horizontal line) introduces trace over a new particle, as well as a factor η; (ii) dashed lines between two different U_2 operators, symbolizing summations over the length of U_1-chains, introduce factors $(1 + \eta f)$ where the operator f and the fugacity z are defined by:

$$f = \frac{zU_1}{1 - \eta z U_1} \qquad \text{and} \qquad z = e^{\beta\mu} \tag{2.72}$$

[18] Alternatively, one can always come back to the "explicit" expression of diagrams, reduce the number of particles over which a trace is taken as was done for instance in (2.51) or (2.52), and check that the calculations are correct.

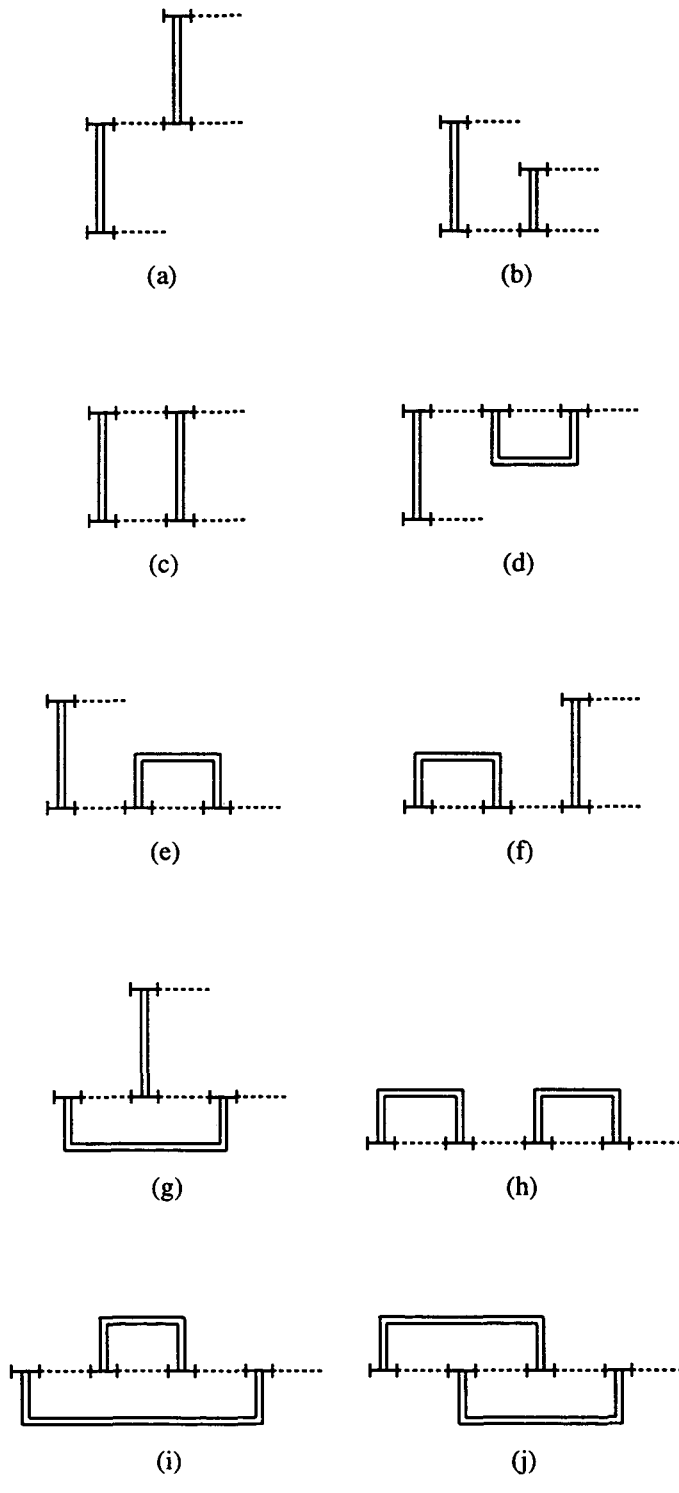


Figure 2.4: Diagrams containing two U_2 Ursell operators

All diagrams have the same counting factor $f_{class} = 1/4$. Diagrams (c) and (j) lead to a contribution proportional to a trace over the states of only two particles, whereas the expressions of the other diagrams are proportional to a trace over three particles.

In this way we obtain for the contributions of diagrams (a) and (b) the "reduced" expressions:

$$\eta \mathrm{Trace}_{1,2,3} \{U_2(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,U_2(2,3)\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\} \tag{2.73}$$

and:

$$\eta \mathrm{Trace}_{1,2,3} \{U_2(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,U(1,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(3)]\} \tag{2.74}$$

The diagram noted (c) in figure 2.4 involves only two distinct particles and yields:

$$\mathrm{Trace}_{1,2} \left\{[U_2(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]]^2\right\} \tag{2.75}$$

As in the previous section, a U_2 which connects two particles inside the same exchange cycle (a "closed U_2") leads to a expression where the U_2 is multiplied by an exchange operator ηP_{ex} , together with a trace over the "interior" particle. In other words, because the P_{ex} operator exchanges the two "legs" of the Ursell operator, the cycle of indices associated to the states of one given particle is now restricted to a part only of the horizontal line: when moving horizontally in the diagram, one has to skip the part of the line that is contained between the two legs; as for this part, it is separately closed under the effect of the P_{ex} operator, so that a trace over a different particle is introduced. For example we get for diagram (d) :

$$\mathrm{Trace}_{1,2,3} \{U_2(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,U_2(2,3)P_{\mathrm{ex}}(2,3)\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\} \tag{2.76}$$

Diagrams (e), (f) and (g) lead to expressions which differ only by the numbering of particles and are therefore equal; as for diagram (h), it gives the contribution:

$$\mathrm{Trace}_{1,2,3} \{U_2(1,2)P_{\mathrm{ex}}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,U_2(2,3)P_{\mathrm{ex}}(2,3)\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\} \tag{2.77}$$

while (i) is equal for the same reason.

The situation is slightly more complex for a "closed U_2" operator when there is another U_2 operator which links a particle "inside" the U_2 with another particle of the same exchange cycle but "outside", as in diagram (j); in this case it turns out that no additional particle is needed. A calculation based either on the rules of the preceding paragraph, or starting from the "explicit expression" of this diagram, shows that its contribution is given by a trace over two particles only:

$$\mathrm{Trace}_{1,2} \{U_2(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,U_2(1,2)P_{\mathrm{ex}}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\} \tag{2.78}$$

We then have to insert the counting factors $\mathfrak{f}_{\mathrm{class}}$. In each diagram, U_2 is the highest order Ursell operator and there are two of them, so that according to formula (62) the

counting factors are the same for all classes and are equal to $1/4$. Finally, using the fact that $U_2(1,2)$ is invariant under exchange of particles 1 and 2 and that the numbering of particles inside the trace is irrelevant (dummy indices), we can write the complete contribution of all diagrams with two U_2 and an arbitrary number of U_1 operators in the form:

$$\Xi_{(2\times U_2)} = \frac{z^4}{2}\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\left[U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\right]^2\right\} + 2\eta z^4 \mathrm{Trace}_{1,2,3}\left\{U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \times U_2^{S,A}(1,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(3)]\right\} \quad (2.79)$$

where $U_2^{S,A}$ is defined as the symmetrized version of U_2:

$$U_2^{S,A} = U_2\frac{1+\eta P_{\mathrm{ex}}(1,2)}{2} \quad (2.80)$$

Diagrams containing a single U_3

The calculation of the contribution of all diagrams with one U_3 and an arbitrary number of U_1 operators is easier as there are only four diagrams and, moreover, there is only one U_l operator which involves more than one particle. Diagram (a) leads to a contribution proportional to:

$$\mathrm{Trace}_{1,2,3}\left\{U_3(1,2,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\right\} \quad (2.81)$$

Diagrams (b) and (c) introduce, in a way which is similar to what happened with "closed U_2" diagrams in the preceding section, an additional 2-particle exchange cycle P_{ex} multiplied by η. In diagram (d) we have a "completely closed U_3", which yields, in an analogous manner, an U_3 multiplied by a 3-particle exchange cycle C_3.

In the calculation of the counting factor $\mathfrak{f}_{\mathrm{class}}$, the additional factor $(g)^{-1}$(which is due to multiple connections) comes in for the first time (see appendix 2.A(ii)). In diagram (a), we have to find the particle with the next-to-lowest index number among two exchange cycles in order to build up the diagram starting from the "base cycle", while in diagram (b) we have to find this particle among two possible candidates of the same exchange cycle. Both cases result in $(g)^{-1} = 1/2$. In the last two diagrams there is no such ambivalence, so $(g)^{-1} = 1$. Furthermore there is a factor $(p_{l_M} \times l_M)^{-1} = 1/3$ which is common to all diagrams.

It turns out that these counting factors are exactly those necessary to reconstruct the 3-particle symmetrizer/antisymmetrizer S_3/A_3 (again using the fact that the indices in the trace are dummy). We thus obtain for the final contribution of all diagrams containing one U_3 operator:

$$\Xi_{(1\times U_3)} = z^3\mathrm{Trace}_{1,2,3}\left\{U_3^{S,A}(1,2,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\right\} \quad (2.82)$$

where $U_3^{S,A}(1,2,3)$ is the symmetrized version of the three particle operator U_3:

$$U_3^{S,A}(1,2,3) = U_3(1,2,3)\begin{matrix}S_3\\A_3\end{matrix} \quad (2.83)$$

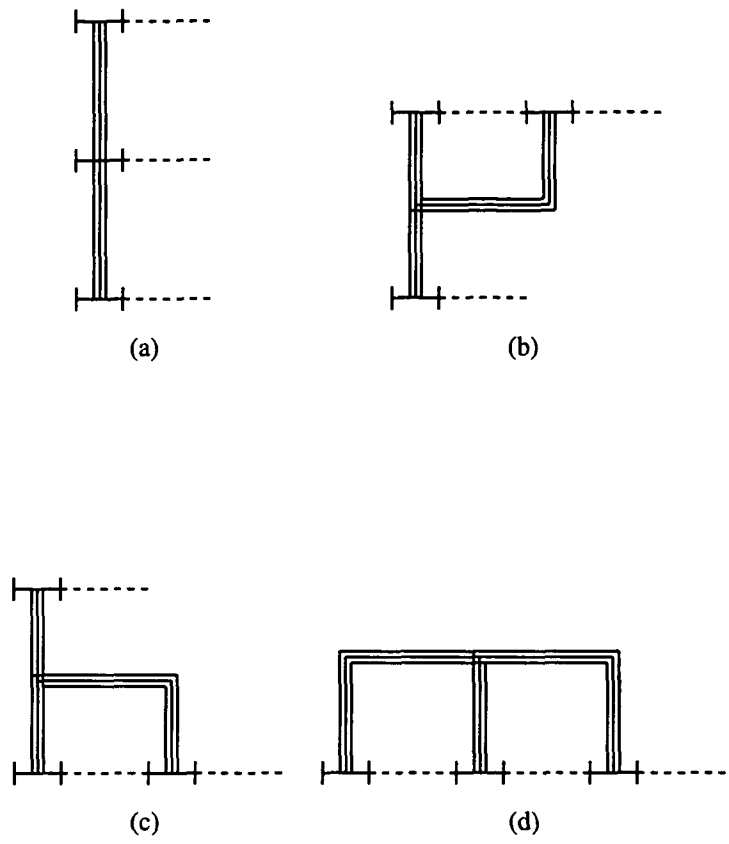


Figure 2.5: Diagrams containing one single U_3 Ursell operator

Diagrams (a) and (b) have counting factor $f_{class} = 1/6$ *while (c) and (d) have* $1/3$. *Together with the particle exchange cycles appearing in the respective reduced expressions, these factors are precisely those that allow to group the three terms into a single final contribution which contains the symmetrizer (or antisymmetriser) of three particles.*

2.5 Discussion and conclusion

A more detailed comparison between this work and other methods of approach can now be done. The basic idea of the method of Beth and Uhlenbeck, or more generally of Mayer cluster expansion methods [58], is to reason in terms of functions which directly give local approximations of the thermal equilibrium. Here we start from Ursell operators which give rise to various contributions in the form of U-C diagrams. This leads to equation (2.42) which provides an exact expression of the grand potential of the system, and expresses it as sum of various terms arising from Ξ-diagrams, already containing a sum over all possible sizes of intermediate exchange cycles. Each term is obtained as an integral (a trace) over a finite number of variables. The general expression is valid for dilute or dense systems as well, such as liquids or even solids; of course for gases it becomes simpler because it can be truncated more abruptly. Indeed, the generalization of the Beth Uhlenbeck formula is obtained by limiting the summation to the first three terms only (the first corresponding to the ideal gas).

The method that we have used is close to the "binary collision approximation" of Lee and Yang [44,45,59]; these authors also introduce the Ursell functions of an auxiliary system obeying Boltzmann statistics, their aim being to establish relations between the Ursell functions of the two systems (see also ref. [60] for a discussion of this type of method, as well as the article by Montroll and Ward [61]). Also, they introduce integrations over the inverse temperature to write their expansions, which is not done here. For these reasons, the similarity between the two methods is real but not obvious, either in the equations, or the diagrams, so that a close examination is necessary. Indeed, it is only after that a first version of the present article had been submitted for publication that the present authors realized that both methods can provide the same results: equation (II.8) of [45] is equivalent to equation (2.63), with different notation; in the same way, (II.18), (II.19) and (II.13) are equivalent to the results of section 2.4.3. Nevertheless, the derivations remain rather different, mostly because we never introduce the Ursell functions of the system of indistinguishable particles in an intermediate step: we directly calculate the contributions of the Ursell operators of the auxiliary Boltzmann system to the grand potential by summing over the lengths of all exchange cycles. This may be the reason why our approach seems to be more compact and easier to handle, and allows writing calculations that are sometimes more general and explicit; in particular we give generic rules for obtaining the counting factors. In forthcoming articles we will exploit this relative simplicity to extend the application of our method beyond the only generalization of the Beth Uhlenbeck formula.

Probably the most popular method for handling interactions in quantum statistical mechanics is using perturbations expansions in terms of the interaction potential, at least as a starting point, as for instance in the well known article of Bloch and De Dominicis [62, 63]. By substituting the collision T matrix for the interaction potential, one can include in the final result an infinite number of terms of the expansion (resummation of ladder diagrams). The analogy with our method is that, as T, the second Ursell operator U_2 (or higher order operators) contain an infinite series of powers in the interaction potential. But the analogy remains limited: in our case, even at intermediate stage of the calculation, one never assumes that the potential is small (which technically avoids any divergence of the terms for hard core potential) and no replacement of V by T is necessary; actually T does not appear explicitly anywhere. The reason behind this difference is that the small parameter in our calculations is by no means the intensity of the potential, but its range b, which is physically a completely different quantity; this may be seen as a general difference between potential and density expansions.

In other words, the use of Ursell operators leads to a grouping of the terms of the usual expansion in terms of V that is different from what other approaches would provide. It extracts the terms that are actually dominant for a dilute gas, where only binary collision occur. For instance the corrections that are first order in b are entirely contained in the generalized Beth Uhlenbeck formula (2.63), which includes among others second order terms in V, while terms of the same order are also contained[19] in the results

[19]The same remark holds for terms of higher order in V which, in our formalism, can be spread over a big variety of $U - C$ diagrams, especially of course if the order is large.

obtained in section 2.4.3; those are therefore contributions to the partition function that correspond to corrections in b of higher order. In a gas of many particles, second order terms in V may arise either form effects taking place within a single binary collision, or from the effect of two successive collisions involving one common particle carrying the information from one collision to the other. A second order calculation in V based on the formalism of the second quantization does not necessarily makes the difference between these two kinds of contributions. In our approach, on the other hand, the particles are indeed numbered at an intermediate stage[20] and it is possible to keep track of "which particle is which", so that terms which are second order in V but negligible if b is small can be sorted out more easily.

Another interesting point of comparison is the more recent calculation by Nozières and Schmitt-Rink [64], who give a calculation of the thermodynamic potential for a system of fermions at low densities. In order to simplify the summation of the diagrams in their calculation, they assume that the matrix elements of the interaction potential are separable into a product of functions; moreover, for brevity, they explicitly include only one phase shift (s wave approximation) so that their result is less general than (2.63). Of course this does not mean that their method can not be generalized to fully recover (2.63), but we have not examined the question. In the same vein, a more detailed comparison between (2.63) with the results of Galitskii [23] for fermions and Belyaev [21] for bosons, valid at zero temperature, would be useful.

In an article in preparation, we show how the fact that our method fully includes the short range effect of the interaction potential on thermal equilibrium can be exploited for a precise study of the properties of the two body density operator, at short or long range, in particular to study of the perturbation of the exchange hole of fermions (or bump for bosons) by a hard core potential. Another article will contain a discussion of the description of Bose Einstein condensation and superfluidity in a dilute gas of bosons, and pairing in a dilute gas of fermions, as briefly sketched in the proceedings of a recent conference[54]. For the study of a the phase transition corresponding to a divergence of the size of the dominant exchange cycles, it is natural to use a formalism where one keeps track of this size explicitly.

Appendix 2.A General Rules for Constructing Diagramms

Our convention for building the diagram associated to any particular term in the double summation (2.26) is the following:

A) we start from the U_l, or the U_l's, that are of highest order $l = l_M$ in this particular term, and identify the particle it (or they) contain(s) that has the lowest index

[20] This does not mean that statistics is not treated exactly in the final result; in fact, the effect of all exchange cycles is included without approximation in our calculations. For instance the fact that (2.63) is expressed mathematically as a trace over two numbered particles should not give the impression that it includes only exchange in a physical system of two particles only, such as a binary molecule: arbitrary long exchange cycles with an infinite number of particles are indeed included in the result. This is illustrated by the fact that (2.63) contains full Fermi Dirac of Bose Einstein distributions inside the degeneracy factors $[1 + \eta f]$. The limitation to exchange inside a binary system is rather a feature of the usual Beth Uhlenbeck theory.

number $n_{\min}$; this particle is considered as the "base particle", and belongs to the "base cycle" from which all the rest of diagram will be drawn. By convention, the base particle is shown first (left position) and the base cycle is that at the lowest position in the figure; for instance, in figures 1-b and 1-d, this base is a three particle cycle.

B) to continue in the construction of the diagram, we add a second generation of cycles. We first use the Ursell operator U_{l_M} that contains the base particle and add the other permutation cycles which include the other particles in the same U_{l_M}; this is done in the order of increasing values for the index number of the particles contained in this U_{l_M}, so that the order of the new cycles is clearly defined. This also defines, for each of them, a "secondary base particle" that is put first in the diagram[21].

C) we continue the addition of this second generation of branches in the diagram by moving along the base cycle and skipping all numbered particles that are in U_1's, until we reach one which belongs to an U_l with $l \geq 2$; we then add additional cycles containing the other particles inside this U_l. We use the same rule an in B) and we define "secondary bases" for the new cycles, so that their representation is also uniquely fixed. Going along all the base cycle in this way completes the first generation of additional cycles.

D) Then we build in the same way the second generation, by starting in succession from all of cycles of the first generation in the order in which they were added, etc. until, eventually, the complete diagram is obtained.

With these conventions, all cycles are individually identified, so that it makes sense to vary their lengths independently to generate all terms of (2.26); this will be useful below for the calculations which lead from the U-C to the Ξ-diagrams. Figure 2.2 shows examples of diagrams; appendix 2.B gives more details on the conventions used in their representation (in particular, it is convenient to assume that, inside the trace, the series of Ursell operators are put before the series of cycles).

Now suppose that we reverse the question: starting from a given diagram, how do we identify its occurrence in the double sum? what is its weight in the summation that gives $\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$? Assume that we throw randomly n_{diag} numbered particles into all available locations. With the precise rules that we have chosen above, it is clear that double counting problems are avoided, but also that not all of these random configurations obtained are allowed. What is the proportion $\mathfrak{f}_{\mathrm{diag}}$ of the configurations that are compatible with our conventions? Let us note p_{l_M} the total number of operators U_{l_M} (those of largest order l_M) appearing in this particular diagram. The reasoning is as follows:

(i) first there is a probability $(p_{l_M} \times l_M)^{-1}$ that the right base particle will be obtained

[21] If the connection is multiple, that is if the additional cycle contains several particles of the same base Ursell operator U_{l_m}, the secondary base particle is that of lowest index number; all the other particles are then automatically located in the diagram by their order in the exchange cycle, and do not play a special role at this stage.

(ii) second, if $l_M \geq 3$, in the construction of successive generations of cycles, either more than one cycle is added from the connections of the same U_l, or there is a multiple connection towards the same cycle (or both). Figure 2.1(e) gives one example of such a multiple connection. In all these cases, additional factors $(g)^{-1}$ are introduced which account for the correct ordering of numbering of secondary base particles.

Thus we obtain:

$$\mathfrak{f}_{\text{diag}} = [p_{l_M} \times l_M \times g]^{-1} \tag{2.84}$$

(this formula is also valid if $l_M = 1$, in which case p_{l_M} is nothing but the size k of the linear exchange cycle). For the generalization of the Beth Uhlenbeck formula, case (ii) never happens and the factors g's do not play any role; they nevertheless enter the calculations of section 2.4.3.

Appendix 2.B Two Examples

The diagram shown in figure 2.2(a) corresponds by definition to the following trace:

$$\text{Trace}_{1,2,3,4,5} \{U_2(1,2)U_2(3,5)U_1(4)C_1(1)C_3(2,3,4)C_1(5)\} \tag{2.85}$$

Our convention is that the Ursell operators are always put before the cycles; the notation $C_3(2,3,4)$ refers to a cycle where the particle numbered 2 replaces that numbered 3, that numbered 3 replaces that numbered 4, and that numbered 4 that numbered 2 (the C_1 's do not produce any change in the positions of the particles). Equation (2.85) gives what we call the "explicit value" of this particular diagram, but it can also be simplified into a "reduced value". This can be done by inserting into (2.85) closure relationships and using summations to introduce products of operators whenever possible. In this case this leads to the expression:

$$\text{Trace}_{1,2,5} \{U_2(1,2)U_2(2,5)U_1(2)\} \tag{2.86}$$

In the explicit value, any numbered particle appears once and only once in every Ursell operator and every cycle; in the reduced form this is not necessarily the case.

In a similar way the diagram shown in figure 2.2(b) is defined by the explicit expression:

$$\text{Trace}_{1,2,3,4,5,6} \{U_2(1,2)U_1(3)U_2(4,5)U_1(6)C_1(1)C_3(2,3,4)\eta C_2(5,6)\} \tag{2.87}$$

while its reduced value is:

$$\eta\text{Trace}_{1,2,5} \{U_2(1,2)U_1(2)U_2(2,5)U_1(5)\} \tag{2.88}$$

2.6 Condensation de paires, triplets, ...

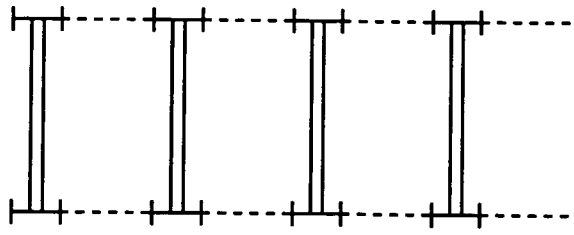
Nous avons obtenu dans les sections précédentes des expressions du grand potentiel Ω pour un gaz dilué qui n'étaient cependant pas valides trop près du point de condensation de Bose-Einstein ou BCS. Cette dernière limitation est due au fait que les corrélations statistiques s'étendent de plus en plus lorsque la température s'approche de la température critique. Par conséquent, un moment donné, l'hypothèse que les interactions ne contribuent que peu à la formation des agrégats (agrégats contenant seulement un ou deux U_2 ou un U_3 par rapport à une taille infinie des cycles d'échange) cesse d'être valide et il faut élargir la somme de diagrammes pertinents. Au cours de notre travail de thèse, nous avons étudié deux façons d'élargir cette somme. L'une prend en compte les diagrammes fortement ramifiés, cas auquel il devient naturel d'introduire un habillage autocohérent de l'opérateur U_1, renormalisé par les interactions binaires. On décrit ainsi le comportement superfluide d'un gaz de bosons. Cet habillage prend en compte des agrégats bien spécifiés à un nombre infini de cycles d'échange et d'opérateurs d'Ursell U_1 et U_2,[22] et conduit à des équations intégrales. Faute de temps, nous avons du nous contenter d'explorer cette question sans l'étudier à fond, de sorte que nous n'en parlerons pas de façon plus détaillée dans cette thèse. La seconde façon de tenir compte de plus de termes fait intervenir des cycles d'échange entre particules appartenant à des opérateurs U_2 d'une manière beaucoup plus compacte, comme nous le verrons dans le paragraphe suivant. Les diagrammes correspondants incluent un nombre infini d'U_1 et U_2, mais se limitent à un ou deux cycles d'échange. Ils ont une structure de type d'échelle ou de boucle d'échange chevauchée où les éléments (les « barreaux » de l'échelle) sont des paires, habillées d'autres particules associées à des U_1. Il s'agit des diagrammes conduisant à la formation de paires BCS. A la fin de la section, nous montrons comment le processus se généralise à la condensation de triplets, quadruplets etc.

2.6.1 Les classes de la formation de paires

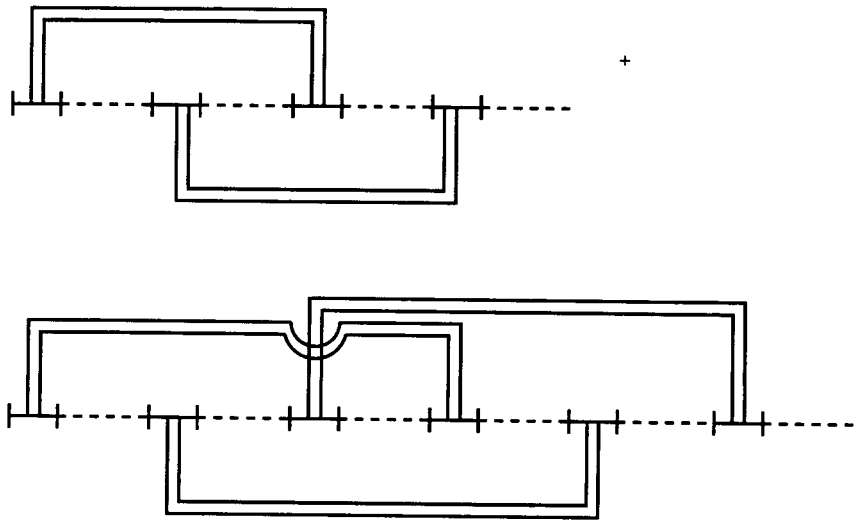
Parmi la variété de diagrammes à un ou deux cycles d'échange, nous en choisissons seulement ceux dont la trace de la forme réduite ne porte que sur les états de deux particules, car la trace sur une troisième particule indépendante introduirait (au moins) un ordre de plus en portée du potentiel. Les classes de cette resommation, visualisées sur la figure 2.6 (voir un exemple de diagramme négligé sur la figure 2.7), sont supposées engendrer les effets d'appariement de particules. Dans la suite nous calculons la correction au grand potentiel due à ces types de diagrammes.

Nous commençons avec les diagrammes à deux cycles d'échange. Le type de diagramme dont nous voulons tenir compte est la généralisation du diagramme (b) de la figure 2.1, obtenue en « collant » un nombre infini de ces diagrammes l'un après l'autre. Même si le résultat de cette resommation se laisse deviner avec un peu de réflexion, nous allons effectuer l'énumération et la réduction de ces diagrammes à titre d'exemple.

22. Des calculs numériques d'intégrales de chemin demontrent que les interactions binaires sont dominantes par rapport aux interactions entre un nombre plus élevé de particules pour des potentiels à courte



(a) Diagrammes en « échelle »



(b) Diagrammes en « boucles d'échange chevauchées»

FIG. 2.6 - *Classes de diagrammes intervenant dans la condensation de paires*

Ces deux classes ont les contributions $\Xi^{\text{paires-échelle}}$ *et* $\Xi^{\text{paires-échange}}$ *au logarithme de la fonction de partition. Elles engendrent les effets de condensation de paires. La contribution du diagramme (a) est égale à*

$$\Gamma_4^{\text{paires-échelle}} = \mathfrak{f}_4^{\text{paires-échelle}}\, Trace_{1,2}\left\{\left[\widehat{U}_2(1,2)\right]^4\right\}$$

avec le facteur de comptage $\mathfrak{f}_4^{\text{paires-échelle}} = 2^{-4}$. *Les diagrammes (b) donnent des expressions du type*

$$\Gamma_{m_2'}^{\text{paires-boucles}} = \mathfrak{f}_{m_2'}^{\text{paires-boucles}}\, Trace_{1,2}\left\{\left[\widehat{U}_2(1,2)\right]^{m_2'} \eta P_{ex}(1,2)\right\}$$

avec le même facteur de comptage:

$$\mathfrak{f}_{m_2'}^{\text{paires-échelle}} = \mathfrak{f}_{m_2'}^{\text{paires-boucles}}$$

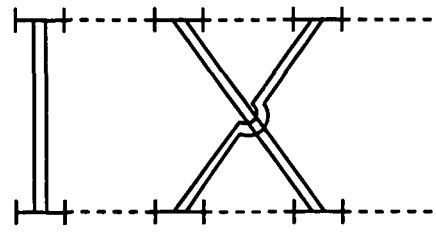


FIG. 2.7 - *Un exemple des diagrammes dont nous ne tenons pas compte*

La forme réduite de ce diagramme vaut - en omettant le facteur de comptage :

$$Trace_{1,2,3}\left\{\widehat{U}_2(1,2)\widehat{U}_2(1,3)P_{ex}(2,3)\widehat{U}_2(1,3)\right\}$$

Elle fait intervenir une trace sur trois particules, contient alors au moins une ordre de plus en portée du potentiel par rapport aux types de diagramme conduisant à une trace qui se limite à deux particules.

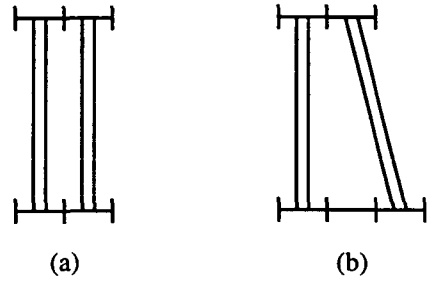


FIG. 2.8 - *Exemples de la classe de diagrammes en échelle*

Les diagrammes de cette figure font partie de la classe paires-échelle. Cette classe est l'une des deux qui engendrent le phénomène de condensation de paires.

Nous commençons avec le diagramme (a) de figure 2.8. Mis à part du facteur de comptage, sa contribution à Log $\mathcal{Z}_{gc}$ est :[23]

$$z^4\text{Trace}_{1,\dots,4}\{U_2(1,2)U_2(3,4)\eta C_2(1,3)\eta C_2(2,4)\} = z^4\text{Trace}_{1,2}\left\{[U_2(1,2)]^2\right\} \tag{2.89}$$

De manière générale, les diagrammes qui ne contiennent aucun U_1, seulement m_2' opérateurs U_2 parallèles l'un à l'autre, donnent des contributions :

$$z^{2m_2'}\text{Trace}_{1,2}\left\{[U_2(1,2)]^{m_2'}\right\} \tag{2.90}$$

Pour permettre un degré de dégénérescence élevé, il faut tenir compte des cycles d'échange infinis. Ces cycles peuvent contenir des particules interagissant avec

portée et ceci même dans la phase condensée ([65]).

23. Nous rappelons que chaque cycle d'échange de longueur paire acquiert un facteur η.

d'autres ou des particules en mouvement libre. Pour ces dernières il faut inclure dans notre traitement des opérateurs U_1 intermédiaires entre les U_2. Si on ajoute un opérateur U_1 dans le cycle d'échange inférieur du diagramme 2.8(a) entre les deux U_2, on obtient le terme suivant (diagramme (b)) :

$$z^5 \mathrm{Trace}_{1,\dots,4} \{U_2(1,2)U_1(3)U_2(4,5)C_3(1,3,4)\eta C_2(2,5)\} \\ = z^4 \mathrm{Trace}_{1,2} \{U_2(1,2)\eta z U_1(1)U_2(1,2)\} \quad (2.91)$$

Si l'on insère l'opérateur U_1 entre les U_2 dans le cycle d'échange supérieur, l'opérateur U_1 dans la forme réduite agira sur la particule numéro 2. Dans le cas où l'opérateur U_1 est inclus après le dernier U_2, l'opérateur U_1 de la forme réduite sera après le deuxième U_2 (toutes ces possibilités mènent bien sûr à la même contribution à Log $\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$). On en déduit que, pour permettre aux cycles d'échange d'acquérir une taille infinie (avec des opérateurs U_1 remplissant les cases entre les U_2), il faut, comme en section 2.4.2 (formule (2.56)), remplacer les U_2 dans la forme réduite par un opérateur $\widehat{U}_2$ qui fait intervenir des opérateur f :[24]

$$U_2(1,2) \longrightarrow U_2(1,2) \left(\sum_{i=0}^{\infty} [\eta z U_1(1)]^i \right) \left(\sum_{j=0}^{\infty} [\eta z U_1(2)]^j \right) \\ = U_2(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] = \widehat{U}_2(1,2) \quad (2.92)$$

Le facteur de comptage de ces diagrammes, qui forment la classe des « diagrammes d'échelle », est déterminé par les conventions de l'appendice 2.A. Selon les résultats du paragraphe (i) de cet appendice, le facteur en question est donné par :

$$\mathfrak{f}_{m_2'}^{\text{paires-échelle}} = [m_2' \times 2]^{-1} \quad (2.93)$$

puisque l'ordre maximal des opérateurs d'Ursell des diagrammes est égal à 2. Nous en déduisons la contribution suivante de cette classe de diagrammes à Log $\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$:

$$\Xi_{\text{paires-échelle}} = \sum_{m_2'=1}^{\infty} \frac{1}{2m_2'} \mathrm{Trace}_{1,2} \left\{ \left(z^2 \widehat{U}_2(1,2) \right)^{m_2'} \right\} \quad (2.94)$$

Les autres diagrammes que nous incluons dans cette étude sont ceux du type de « boucles d'échange chevauchées » (figure 2.6(b)). Le diagramme, qui contient deux U_2 et toutes les quatre particules dans un cycle d'échange (figure 2.9), contribue le terme suivant à Log $\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$:

$$z^4 \mathrm{Trace}_{1,2,3,4} \{U_2(1,3)U_2(2,4)\eta C_4(1,2,3,4)\} \\ = z^4 \mathrm{Trace}_{1,2} \{[U_2(1,2)]^2 \eta P_{\mathrm{ex}}\} \quad (2.95)$$

24. Encore une fois nous utilisons le fait que $\eta^2 \equiv 1$.

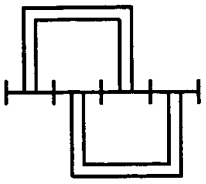


FIG. 2.9 - *Exemple de la classe de diagrammes d'échange*

Si l'on allonge le cycle d'échange en ajoutant plus d'opérateurs U_2, les contributions à Log $\mathcal{Z}_{\rm gc}$ sont données par :

$$z^{2m_2'}\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{[U_2(1,2)]^{m_2'}\,\eta P_{\rm ex}\right\} \tag{2.96}$$

Comme dans la classe des diagrammes en échelle, il faut tenir compte dans cette resommation des particules qui ne ressentent aucune interaction avec d'autres. C'est pourquoi nous plaçons des opérateurs U_1 dans les cycles d'échange. La sommation sur le nombre de ces opérateurs donne lieu au même remplacement (2.92). Le facteur de comptage de ces diagrammes est le même que celui des diagrammes en échelle : $\wp^{\text{paires-boucles}} = (m_2' \times 2)^{-1}$, de sorte que nous obtenons :

$$\Xi_{\text{paires-boucles}} = \sum_{m_2'=1}^{\infty} \frac{1}{2m_2'}\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\left(z^2\widehat{U}_2(1,2)\right)^{m_2'}\eta P_{\rm ex}\right\} \tag{2.97}$$

Combinant les contributions de ces classes, on arrive à :

$$\begin{aligned}\Xi_{\text{paires}} &= \Xi_{\text{paires-échelle}} + \Xi_{\text{paires-boucles}} \\ &= \sum_{m_2'=1}^{\infty} \frac{1}{m_2'}\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\left(z^2\widehat{U}_2(1,2)\right)^{m_2'}\frac{1+\eta P_{\rm ex}}{2}\right\}\end{aligned} \tag{2.98}$$

Utilisant le fait que le symétriseur/antisymétriseur $\frac{1+\eta P_{\rm ex}}{2}$ est idempotent, on peut mettre cette expression sous la forme :

$$\Xi_{\text{paires}} = \mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\sum_{m_2'=1}^{\infty}\frac{1}{m_2'}\left(z^2\widehat{U}_2(1,2)\frac{1+\eta P_{\rm ex}}{2}\right)^{m_2'}\right\} \tag{2.99}$$

La somme sur m_2' donne un logarithme (2.47) de sorte que le résultat final est :

$$\boxed{\Xi_{\text{paires}} = -\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\mathrm{Log}\left[1 - z^2\widehat{U}_2^{S,A}(1,2)\right]\right\}} \tag{2.100}$$

où l'opérateur de paires $\widehat{U}_2^{S,A}$ est la version symétrisée de $\widehat{U}_2$:

$$\widehat{U}_2^{S,A}(1,2) = U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \tag{2.101}$$

Remarque : dans la contribution Ξ_{paires} se trouve déjà inclus le terme de la formule de Beth Uhlenbeck généralisée, $\Xi_{(1\times U_2)}$, correspondant aux diagrammes avec un U_2 et un nombre arbitraire de U_1, de sorte que ce dernier n'apparaît pas séparément dans la discussion suivante.

2.6.2 Discussion

Le terme Ξ_{paires} ressemble à la contribution du système sans interaction à $\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}}$, (2.48), l'opérateur et la trace à un corps étant remplacés par ceux à deux particules et η mis à $+1$. Les paires de particules, bosons ou fermions, ont donc acquis la symétrie de bosons, alors que la symétrie des particules simples n'intervient plus que dans l'opérateur $\widehat{U}_2^{S,A}(1,2)$. De façon tout à fait analogue au gaz parfait, une condensation du type Bose-Einstein de paires peut donc avoir lieu dès que la valeur propre maximale de $z^2\widehat{U}_2^{S,A}$ atteint 1 – et ceci non seulement pour des bosons, mais aussi pour des paires de fermions. Cette condition permet de déterminer la valeur critique du potentiel chimique.

Pour que cette condensation de paires soit possible, il faut évidemment que toutes les valeurs propres de U_2 ne soient pas négatives. Or, en absence d'un potentiel extérieur on peut factoriser U_2 en deux opérateurs, l'un étant associé au mouvement du centre de masse, l'autre au mouvement relatif. Comme les valeurs propres de la partie du centre de masse sont positives, il est donc nécessaire que la partie dépendant du potentiel d'interaction ait une valeur propre positive. Un calcul au premier ordre en V de l'opérateur U_2 indique que cette situation correspond plutôt à un potentiel attractif. Mais nous le verrons plus tard que, dans le cadre d'un traitement non perturbatif, même un potentiel répulsif peut conduire à une condensation de paires (voir section 4.4).

L'expression que nous avons obtenue rappelle l'*approche de l'équilibre quasi-chimique de la supraconductivité* développée par Schafroth, Butler et Blatt dans les années 1950 (voir [66] et les références y figurant). Ces auteurs ont également proposé la compréhension de la supraconductivité par formation de bosons à partir de paires de fermions. Ils sont allés plus loin et ont introduit des opérateurs auto-consistants (approximation de champ moyen). Cependant, à cause des difficultés algébrique, il n'a pas été possible à ces auteurs de reproduire l'ensemble des résultats de la théorie BCS.

2.6.3 Autres canaux de condensation

La formation d'amas plus grands se laisse traiter de la même manière que celle de paires. A titre d'exemple nous en citons ici le cas de condensation de triplets. Comme dans le cas de la condensation de paires, nous limitons l'ensemble des diagrammes à ceux d'ordre minimal en portée du potentiel. Les quatre classes de diagrammes qui mènent à une forme réduite faisant intervenir une trace sur les états de seulement trois particules sont obtenus par l'enchaînement/chevauchement de chacun des quatre diagrammes de la figure 2.5 : Pour que les traces présentes dans la forme originale des contributions des diagrammes se réduisent à des sommes sur trois particules, il faut que les cycles d'échange transposent tous les triplets de particules contenues dans un U_3 en bloc dans le U_3 suivant. Ceci n'est possible que si tous les opérateurs U_3 d'un diagramme lient les cycles d'échange de la même façon. La figure 2.10 représente des exemples des classes dont nous tenons compte; en revanche des diagrammes « croisés »comme sur figure 2.11 sont négligés. Les U_1 intermédiaires ne jouent aucun rôle dans cette considération.

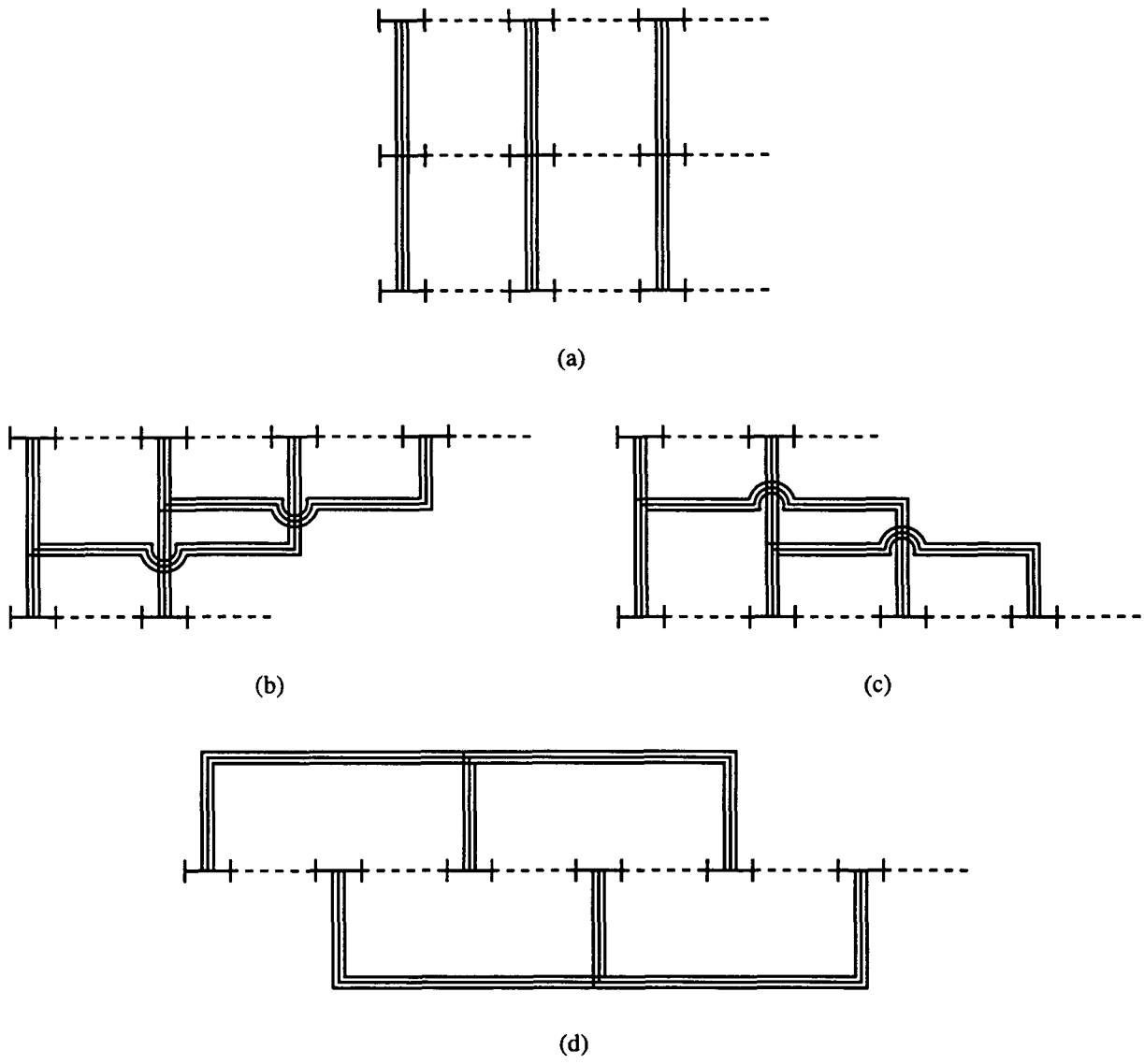


FIG. 2.10 - *Condensation de triplets*

Les diagrammes qui interviennent dans la sommation pour engendrer la formation de triplets sont obtenus en généralisant les diagrammes de cette figure afin de tenir compte d'un nombre arbitraire d'opérateurs U_3. Dans chacun de ces diagrammes les cycles d'échange transposent les particules contenues dans l'un des opérateurs U_3 dans l'opérateur suivant, où elles apparaissent à la même position. Dans le cas du diagramme (b), par exemple, le cycle d'échange supérieur transpose la particule de la position gauche du premier U_3 vers la position gauche du deuxième, celle de la position droite du premier vers la position droite du deuxième et finalement ferme le cycle d'échange.

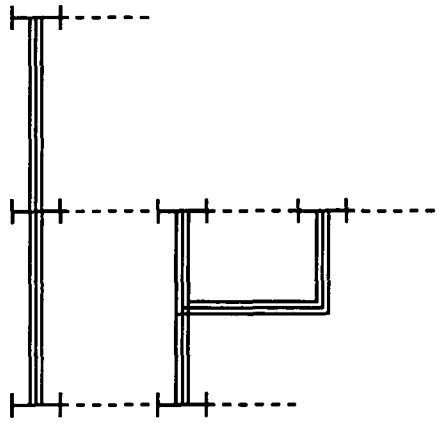


FIG. 2.11 - *Exemple des diagrammes négligés dans la formation de triplets*

Le diagramme de cette figure donne, à part du facetur de comptage, une contribution de

$$\begin{aligned} &Trace_{1-6}\left\{\widehat{U}_3(1,3,6)\widehat{U}_3(2,4,5)\eta C_2(1,2)C_3(3,4,5)C_1(6)\right\} \\ &= \eta Trace_{1-4}\left\{\widehat{U}_3(1,2,3)\widehat{U}_3(1,2,4)P_{ex}(2,4)\right\} \end{aligned}$$

Cette contribution fait intervenir une sommme sur les états de quatre particules. Comme l'intégration supplémentaire (par rapport à la trace sur seulement trois particules qui apparaît dans les contributions des diagrammes retenus) introduit (au moins) un ordre de la portée du potentiel en plus, nous négligeons ce type de terme. Ce diagramme peut intervenir dans la formation d'objets plus complexes (6 particules), un sujet que nous n'avons pas approfondi.

En procédant comme dans la section précédente, nous obtenons la contribution à $\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$ due à la formation de triplets :

$$\boxed{\Xi_{\mathrm{triplets}} = -\eta \mathrm{Trace}_{1,2,3}\left\{\mathrm{Log}\left[1 - \eta z^3 \widehat{U}_3^{S,A}(1,2,3)\right]\right\}} \tag{2.102}$$

avec l'analogue de l'opérateur $\widehat{U}_2^{S,A}$ défini par :

$$\widehat{U}_3^{S,A}(1,2,3) = U_3^{S,A}(1,2,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)] \tag{2.103}$$

Comme attendu, la symétrie des particules (bosons ou fermions) apparaît cette fois dans Ξ_{triplets} directement par la présence des facteurs η. Les amas formés par 3 fermions se comportent dans cette approximation comme des particules fermioniques, une condensation du type Bose-Einstein n'est donc pas possible. En revanche, des amas de quatre fermions ont à nouveau cette possibilité (cf. [67] où une condensation de ces structures est démontrée à partir d'une théorie de champ moyen).

3. Les opérateurs densité réduits

Introduction au chapitre

LES OPÉRATEURS DENSITÉ RÉDUITS constituent l'outil du choix pour étudier les propriétés microscopiques des systèmes macroscopiques. Dans ce chapitre nous montrons la démarche à suivre pour obtenir ces opérateurs à partir de la fonction de partition pour des gaz dilués. Comme nous traitons les interactions entre deux particules de manière nonperturbative, nous pouvons espérer que les opérateurs densité à deux corps provenant de notre formalisme fournissent une description valable même à courte distance entre particules. Nous obtenons ces expressions des opérateurs densité réduits par une démarche qui ressemble aux méthodes de réponse linéaire : l'opérateur cherché s'obtient en introduisant une perturbation extérieure et en moyennant sur l'ensemble thermodynamique.

Dans l'ensemble canonique, l'opérateur densité réduit à une particule $\rho_I^{(N)}$est défini par une trace partielle sur les états des $N-1$ autres particules; la version symétrique s'écrit : [1]

$$\left\langle \theta \mid \rho_I^{(N)} \mid \varphi \right\rangle = \mathrm{Trace}_{1,\ldots,N} \left\{ \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} K_N \sum_{i=1}^{N} |i:\varphi\rangle \langle i:\theta| \right\} / Z_N \tag{3.1}$$

où $K_N = \mathrm{e}^{-\beta h \mathfrak{H}_N}$, S/A est le symétriseur/antisymétriseur et où Z_N est la fonction de partition canonique :

$$Z_N = \mathrm{Trace}_{1,\ldots,N} \left\{ \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} K_N \right\} \tag{3.2}$$

Une fois que cet opérateur est connu, on peut en déduire des quantités microscopiques (à une particule), comme par exemple la densité locale de particules :

$$n(\mathbf{r}) = \left\langle \mathbf{r} \mid \rho_I^{(N)} \mid \mathbf{r} \right\rangle \tag{3.3}$$

ou l'énergie cinétique :

$$\overline{E}_{\mathrm{cin}} = \mathrm{Trace}_1 \left\{ \frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m} \rho_I^{(N)} \right\} \tag{3.4}$$

Pour obtenir la trace partielle de (3.1), on exprime l'opérateur K_N de la définition (3.1) par son développement en opérateurs d'Ursell (2.5) et, dans chaque opérateur U_q

1. Nous adaptons ici la normalisation au nombre de particules : $\mathrm{Trace}_{1,\ldots,N}\{\rho_I^{(N)}\} = N$

d'ordre supérieur à 1, on fait apparaitre des opérateurs U_1 en remplaçant par exemple U_2 selon :

$$U_2(1,2) \to U_1(1)U_1(2)\overline{U}_2(1,2) \tag{3.5}$$

Ensuite, on peut introduire un terme source pour chaque U_1 selon :

$$U_1 \to U_1\,(1 + \epsilon\ |\varphi\rangle\,\langle\theta|) \tag{3.6}$$

En dérivant l'expression ainsi obtenue par rapport à ϵ, on démontre l'égalité suivante :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\epsilon}\,\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_N = \left\langle \theta \mid \rho_I^{(N)} \mid \varphi \right\rangle \tag{3.7}$$

De façon analogue, on arrive à l'expression de l'opérateur densité réduit dans l'ensemble grand-canonique ρ_I :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\epsilon}\,\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}} = \langle \theta \mid \rho_I \mid \varphi \rangle \tag{3.8}$$

Ce raisonnement se généralise aux opérateurs densité réduits à plus d'une particule. Le terme de source est modifié, car il contient alors la somme de plusieurs projecteurs avec des constantes de poids $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots$ différentes. La dérivée croisée de $\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$ par rapport aux constantes $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots$ donne ensuite l'élément de matrice cherché (en plus des produits faisant intervenir des élements de matrice d'opérateurs densité à moins de particules). Donnons à titre d'exemple l'opérateur à deux particules :

$$\langle \theta_1, \theta_2 \mid \rho_{II} \mid \varphi_1, \varphi_2 \rangle = \langle \theta_1 \mid \rho_I \mid \varphi_1 \rangle \langle \theta_2 \mid \rho_I \mid \varphi_2 \rangle + \frac{\partial^2}{\partial\epsilon_1 \partial\epsilon_2}\,\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}} \tag{3.9}$$

De cet opérateur, on peut en déduire des quantités microscopiques à deux particules comme la fonction de corrélation :

$$g(\mathbf{r}_1;\mathbf{r}_2) = \frac{1}{N(N-1)}\,\langle \mathbf{r}_1;\mathbf{r}_2 \mid \rho_{II} \mid \mathbf{r}_1;\mathbf{r}_2 \rangle \tag{3.10}$$

ou l'énergie potentielle d'interaction :

$$\overline{E}_{\mathrm{pot}} = \frac{1}{2}\mathrm{Trace}_{1,2}\,\{V_{\mathrm{int}}(1,2)\rho_{II}(1,2)\} \tag{3.11}$$

Les différents termes de $\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$ obtenus par notre méthode donnent les opérateurs densité réduits dans l'ordre de perturbation considéré. Pour le gaz parfait nous obtenons les résultats connus, qui font intervenir le facteur de Fermi/Bose f défini par (2.72) :

$$\rho_I(1) = f(1) \tag{3.12}$$

$$\rho_{II}(1,2) = [f(1) \otimes f(2)]\,[1 + \eta P_{\mathrm{ex}}] \tag{3.13}$$

Les termes $\delta\rho_I$ et $\delta\rho_{II}$ provenant du terme du premier ordre en U_2, $\Xi_{1\times U_2}$ (2.12), sont donnés par :

$$\delta\rho_I = 2z^2\,[1 + \eta f(1)]\,\mathrm{Trace}_2\left\{U_2^{S,A}(1,2)\,[1 + \eta f(2)]\right\}\,[1 + \eta f(1)] \tag{3.14}$$

et

$$\delta\rho_{II} = 2z^2\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] + [1+\eta P_{\rm ex}]\,[f(1)\otimes\delta\rho_I(2)]\,[1+\eta P_{\rm ex}] \quad (3.15)$$

Le terme de la deuxième ligne de l'expression de $\delta\rho_{II}$ est du type champ moyen, puisque la seule corrélation entre les deux particules dont il tient compte est de nature statistique. En revanche, le terme de la première ligne est dominé par les corrélations hamiltoniennes, originaires de l'interaction. C'est ce terme qui domine le comportement physique dans le cas où les effets d'interaction sont importants, par exemple quand les deux particules se trouvent proche l'une à l'autre (à l'échelle de la portée du potentiel).

Lorsqu'on pousse le calcul aux ordres suivants, et de manière générale, les termes $\delta\rho_I$ et $\delta\rho_{II}$, correspondant à des approximations différentes de la fonction de partition, contiennent des opérateurs d'Ursell – le cas échéant avec des traces partielles sur des états des particules intermédiaires ou supplémentaires – entourés des facteurs d'occupation de l'espace d'impulsion $[1+\eta f]$. Dans le cas particulier où le potentiel d'interaction est faible, on peut développer U_2 en puissances du potentiel d'interaction, et on démontre que, dans le cas de l'opérateur densité à un corps des fermions, seuls les états proches de la surface de Fermi donnent lieu à une correction par rapport au ρ_I du gaz parfait – justement à cause de ces facteurs d'occupation de l'espace d'impulsion.

Comme première application de ces calculs nous avons étudié la fonction de corrélation à deux corps pour un gaz de sphères dures, en calculant l'élément de matrice diagonal de ρ_{II} en représentation position. Nous nous sommes particulièrement intéressés à vérifier que la fonction de corrélation s'annule bien exactement dès que les sphères dures des deux particules se recouvrent. Nous avons constaté que le premier terme du développement de $\mathcal{Z}_{\rm gc}$, $\Xi_{1\times U_2}$, permet à imposer l'annulation de l'élément de matrice dans la mesure où, soit les particules du bra, soit ceux du ket se recouvrent. Cependant, pour assurer cette propriété dans le cas général, on constate qu'il est nécessaire d'inclure les corrections d'ordre suivant (les diagrammes contenant deux U_2 ou un U_3) . Il faut donc des opérateurs « transmettant » (en quelque sorte) les effets de l'interaction pour les deux fonctions d'onde de particules libres, du bra et du ket, afin de bien engendrer le comportement physique attendu.

La suite de ce chapitre décrit les calculs et résultats en détail. Elle est constituée d'un article publié ([68])[2] :

Ursell Operators in Statistical Physics II: microscopic properties of a dilute quantum gas.

3.1 Introduction

In a previous article [49] [*chapitre 2 de ce mémoire*] (see also [54]), we introduced a method for obtaining the partition function of a degenerate gas which combines the

2. Quelques corréctions ont été apportées et la typographie adaptée

use of cluster operators U_l, associated with an auxiliary system of distinguishable particles, with exchange cycles for an exact treatment of statistics. The basic motivation of this technique was to give a better treatment of correlations between particles than in mean field approaches, especially at short relative distances for strongly repulsive interaction potentials. In this article we show that the method is indeed a useful tool for obtaining explicit expressions of partial density operators, in particular of the two particle density operators which, in principle, contains all two body correlations. The expressions remain valid at short distances even in the presence of hard core potentials, which means that they include physical effects occurring "in the middle of a collision" and not only asymptotic effects occurring long before or after collision (phase shifts).

In transport theory, an important issue is the derivation of kinetic equations, which is usually made by introducing appropriate approximations into the exact equations of motion of the system. A traditional approach is to start from the first equations of the BBGKY hierarchy and to use them to derive (or to guess) an approximate expression for the two body density operator, which becomes a function of the one body density operator. The expression is then inserted into the first BBGYK equation in order to obtain the desired kinetic equation (see for instance [69]). A well known example is the derivation given by Snider [70] of a quantum kinetic equation bearing his name for particles with or without internal states. The detailed study of the properties of reduced density operators may therefore be a useful point of comparison in this domain; for instance, one may require that the ansatz made for the expression of the two body density operator (as a function of the one body operator) be valid at equilibrium, which provides an useful guide.

3.2 Partial density operators

In classical physics, the one particle distribution function in a homogeneous system is independent of the interaction potential; this is because the contribution of the potential factorizes out of the distribution, which leaves in factor a gaussian distribution function of the momentum. In quantum statistical mechanics, since the operators corresponding to kinetic and potential energy do not commute, this factorization does not take place so that the momentum distribution is no longer a gaussian. One sometimes uses the words "diffraction effects" to characterize these changes (since they arise from the wave properties of particles), as opposed to "quantum statistics effects", which arise from the consequences of particle indistinguishability and also modify the distribution function. Our purpose in this section is to study how these two effects combine in the expression of the one and two particle density operators, in terms of the second Ursell operator U_2, of the ternary operator U_3, etc. We will use a technique based on the partial derivative of the operators, already sketched in [54], which starts from the following general expression of the canonical partition function Z_N (the notation is the same as in [49] [*chapitre 2*]):

$$Z_N = \text{Trace} \left\{ K_N \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} \right\} \tag{3.16}$$

where the symmetrizer S applies for bosons, the antisymmetrizer A for fermions, and where K_N is the exponential of the N particle hamiltonian $\mathfrak{H}_N$ multiplied by the inverse temperature β:

$$K_N = e^{-\beta \mathfrak{H}_N} \tag{3.17}$$

which can be expanded as:

$$K_N = \sum_{\{U\}} \underbrace{U_1(.)U_1(.)...U_1(.)}_{m'_1 \, factors} \times \underbrace{U_2(.,.)U_2(.,.)...U_2(.,.)}_{m'_2 \, factors} \times U_3(.,.,.) .... \tag{3.18}$$

We recall the definitions of the lowest order Ursell operators:

$$\begin{aligned} U_1(1) &= e^{-\beta \mathfrak{H}_1(1)} \\ U_2(1,2) &= e^{-\beta \mathfrak{H}_2(1,2)} - U_1(1) \times U_1(2) \end{aligned} \tag{3.19}$$

By recurrence, higher order are obtained in a similar way.

3.2.1 One particle density operator

If we set[3]:

$$U_l(1,2,..l) = \overline{U}_l(1,2,..l) \, [U_1(1) \times U_1(2) \times ... \times U_1(l)] \tag{3.20}$$

we can choose U_1 and the $\overline{U}_l$'s, instead of the U_l's, to characterize the cluster properties of K_N; by definition $\overline{U}_1$ is equal to one. Assume now that we keep all $\overline{U}_l$'s constant and vary U_1 according to[4]:

$$dU_1 = dx \times U_1 \mid \varphi\rangle\langle\theta \mid \tag{3.21}$$

What is then the variation of Z? Inserting this relation into (3.20), then into (3.18) and finally into (3.16), we get:

$$dZ_N = dx \; \text{Trace}_{1,2,3,...N} \left\{ \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} K_N \sum_{i=1}^{i=N} \mid i : \varphi\rangle\langle i : \theta \mid \right\} \tag{3.22}$$

[3] With this definition, $\overline{U}_l$ is non hermitian; we could of course introduce only hermitian operators by symmetrizing (3.20), namely by putting square roots of U_1's on both sides of $\overline{U}_2$, but this is not especially useful for our calculations.

[4] As $\overline{U}_l$, the variation dU_1 is non hermitian in general. Note that the U_1's are at the end of the product in (3.20) while they are at the beginning in (3.21); in fact, we could also choose the opposite convention where the U_1's are at the other end in both equations.

Since the canonical N particle density operator is equal to:

$$\rho_N^{can} = [Z_N]^{-1} \begin{Bmatrix} S \\ A \end{Bmatrix} K_N \begin{Bmatrix} S \\ A \end{Bmatrix} \tag{3.23}$$

expression (3.22) is nothing but the product of Z_N by the average value of the one particle operator $\sum_{i=1}^{i=N} \mid i : \varphi\rangle\langle i : \theta \mid$. Therefore, in terms of the canonical one particle density operator[5] ρ_I^{can}, we obtain:

$$\frac{d}{dx} \text{Log } Z_N = \text{Trace} \{\mid \varphi\rangle\langle\theta \mid \rho_I^{can}\} = \langle\theta \mid \rho_I^{can} \mid \varphi\rangle \tag{3.24}$$

(the derivative with respect to x is meant at the value $x = 0$). We can therefore obtain reduced density matrices from this kind of operatorial variations.

If the grand canonical ensemble is used, the many-particle density operator is defined by:

$$\rho_{gc} = [\mathcal{Z}_{\text{gc}}]^{-1} \sum_N e^{\beta\mu N} \begin{Bmatrix} S \\ A \end{Bmatrix} K_N \begin{Bmatrix} S \\ A \end{Bmatrix} \tag{3.25}$$

and a similar reasoning provides the following relation involving the grand canonical one particle density operator ρ_I (for the sake of simplicity we now omit the index g.c.):

$$\frac{d}{dx} \text{Log } \mathcal{Z}_{\text{gc}} = \text{Trace} \{\rho_I \mid \varphi\rangle\langle\theta \mid\} = \langle\theta \mid \rho_I \mid \varphi\rangle \tag{3.26}$$

This formula shows that ρ_I is the "operatorial derivative" of $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$.

3.2.2 Two particle density operator

We now vary U_1 according to (see note 4):

$$dU_1 = U_1 \left[dx \mid \varphi_x\rangle\langle\theta_x \mid + dy \mid \varphi_y\rangle\langle\theta_y \mid \right] \tag{3.27}$$

and we calculate the term, in the variation of Z, which is proportional to $dx \times dy$ (cross term). This term is given by:

$$dx \times dy \times \text{Trace}_{1,2....N} \left\{ \begin{Bmatrix} S \\ A \end{Bmatrix} K_N \sum_{i \neq j} \mid i : \varphi_x; j : \varphi_y\rangle\langle i : \theta_x; j : \theta_y \mid \right\} \tag{3.28}$$

which is nothing but the product:

$$dx \times dy \times Z_N \times \langle\theta_x, \theta_y \mid \rho_{II}^{can} \mid \varphi_x, \varphi_y\rangle \tag{3.29}$$

containing the matrix element of the two particle density operator[6] ρ_{II}^{can} which is therefore given by:

$$\langle\theta_x, \theta_y \mid \rho_{II}^{can} \mid \varphi_x, \varphi_y\rangle = [Z_N]^{-1} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} Z_N \tag{3.30}$$

[5] Here we take the convention where the operator ρ_I is normalized to the number N of particles (not to one).

[6] with a normalization to $(N-1)N$.

Going over to the grand canonical ensemble leads to the relation:

$$\langle \theta_x , \theta_y \mid \rho_{II} \mid \varphi_x, \varphi_y \rangle = [\mathcal{Z}_{\rm gc}]^{-1} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \mathcal{Z}_{\rm gc} \tag{3.31}$$

(where the derivative is meant in $x = y = 0$ and, again, the index gc is not explicitly written for the reduced operator). But since:

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \operatorname{Log} \mathcal{Z}_{\rm gc} = [\mathcal{Z}_{\rm gc}]^{-1} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}_{\rm gc}}{\partial x \partial y} - [\mathcal{Z}_{\rm gc}]^{-2} \frac{\partial \mathcal{Z}_{\rm gc}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathcal{Z}_{\rm gc}}{\partial y} \tag{3.32}$$

we get, with the help of relation (3.26) (again, for simplification, we suppress the index g.c. from the reduced operator):

$$\langle \theta_x , \theta_y \mid \rho_{II} \mid \varphi_x \, \varphi_y \rangle = \langle \theta_x \mid \rho_I \mid \varphi_x \rangle \langle \theta_y \mid \rho_I \mid \varphi_y \rangle + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \operatorname{Log} \mathcal{Z}_{\rm gc} \tag{3.33}$$

This is the starting point of our calculations below.

3.3 Application to a dilute gas

In [49] [*chapitre 2*] we obtained expressions for $\operatorname{Log} \mathcal{Z}_{\rm gc}$ that are valid for dilute gases. We now combine them with the preceding formulas to obtain reduced density operators, starting from the simple example of an ideal gas (no interactions).

3.3.1 Ideal gas

For an ideal gas we have:

$$\operatorname{Log} \mathcal{Z}_{\rm gc} = -\eta \operatorname{Trace} \{ \operatorname{Log} [1 - \eta z U_1] \} = \eta \sum_{n=1}^{\infty} n^{-1} \operatorname{Trace} \{ [\eta z U_1]^n \} \tag{3.34}$$

where η is equal to 1 for bosons, -1 for fermions, and:

$$z = e^{\beta \mu} \tag{3.35}$$

One particle density operator

When U_1 varies according to (3.21) in the right hand side of (3.34), we have to vary the n factors of the product $[\eta z U_1]^n$. But, in fact, all these terms are equal since, in each of them, a permutation of the operators under the trace allows to bring the variation in front of all the other operators; the factor n^{-1} disappears in this operation and the result is:

$$d \operatorname{Log} \mathcal{Z}_{\rm gc} = \eta \, dx \times \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Trace} \{ \eta z U_1 \mid \varphi \rangle \langle \theta \mid [\eta z U_1]^{n-1} \} \tag{3.36}$$

or:

$$\frac{d \operatorname{Log} \mathcal{Z}_{\rm gc}}{dx} = \eta \langle \theta \mid \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Trace} \{ [\eta z U_1]^n \} \mid \varphi \rangle = \langle \theta \mid \rho_I \mid \varphi \rangle \tag{3.37}$$

This provides the simple result:

$$\rho_I = f \tag{3.38}$$

where the operator f is defined as a function of the operator U_1 as:

$$f = \frac{zU_1}{1 - \eta z U_1} \tag{3.39}$$

or, more explicitly (in the case where the external potential is zero), as:

$$f = \frac{e^{-\beta\left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \mu\right]}}{1 - \eta e^{-\beta\left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \mu\right]}} \tag{3.40}$$

(this is nothing but the operatorial version of the well known Fermi of Bose functions for an ideal quantum gas). We therefore recover a classical result.

Two particle density operator

We now vary U_1 in (3.34) according to (3.27) and look for the cross terms in dx and dy. As in the preceding section, in every term of the sum over n the replacement by $dx \mid \varphi_x\rangle\langle\theta_x \mid U_1$ can occur in n different places, but can be brought back to the front position by circular permutation under the trace, which suppresses the factor n^{-1}. The cross term appearing in $\eta\, n^{-1}\text{Trace}\,\{[\eta z U_1]^n\}$ is therefore equal to:

$$\eta\, dx\, dy\, \text{Trace}\left\{\eta z U_1 \mid \varphi_x\rangle\langle\theta_x \mid \sum_{p=0}^{n-2} [\eta z U_1]^p\, \eta z U_1 \mid \varphi_y\rangle\langle\theta_y \mid [\eta z U_1]^{n-2-p}\right\} \tag{3.41}$$

which, when summed over n, introduces the quantity:

$$\eta \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{p=0}^{n-2} \langle\theta_x \mid [\eta z U_1]^{p+1} \mid \varphi_y\rangle\langle\theta_y \mid [\eta z U_1]^{n-1-p} \mid \varphi_x\rangle \tag{3.42}$$

We can set $p' = n - p - 2$ and replace the summations over n and p by summations over n and p'; then, each of these summations introduces again the operator f defined in (3.39). Inserting this into the right hand side of (3.33), we get:

$$\langle\theta_x, \theta_y \mid \rho_{II} \mid \varphi_x, \varphi_y\rangle = \langle\theta_x \mid f \mid \varphi_x\rangle \times \langle\theta_y \mid f \mid \varphi_y\rangle + \eta\langle\theta_x \mid f \mid \varphi_y\rangle \times \langle\theta_y \mid f \mid \varphi_x\rangle \tag{3.43}$$

or:

$$\rho_{II}(1,2) = [f(1) \otimes f(2)]\,[1 + \eta P_{\text{ex}}] \tag{3.44}$$

where $f(1)$ is the f operator with the momentum of the first particle inside U_1:

$$f(1) = \frac{zU_1(1)}{1 - \eta z U_1(1)} \tag{3.45}$$

while $f(2)$ has the same definition for the other particle; $P_{\rm ex}$ is the exchange operator between particles 1 and 2. Equation (3.44) is of course a known result for ideal gases.

Remark: from (3.38) and (3.44), since the trace of the one particle density operator is equal to the average number of particles, we obtain:

$$\mathrm{Trace}_2\{\rho_{II}(1,2)\} = \langle N\rangle \rho_I(1) + \eta\,[\rho_I(1)]^2 \tag{3.46}$$

which shows that the partial trace of the two body density operator is not merely proportional to the one particle density operator, but contains an additional term proportional to $[\rho_I(1)]^2$. This is a consequence of the use of the grand canonical ensemble where the number of particles N fluctuates, so that for instance the average of the product $N(N-1)$ is not exactly equal to $\langle N\rangle\langle N-1\rangle$. In the thermodynamic limit, nevertheless, where the volume and $\langle N\rangle$ tend simultaneously to infinity (while their ratio remains constant), since the expression of the operator ρ_I itself does not depend on the volume, it is clear that the first term in (3.46) is dominant, so that the usual trace relation of the canonical ensemble:

$$\mathrm{Trace}_2\{\rho_{II}^{can}(1,2)\} = \langle N-1\rangle \rho_I^{can}(1) \tag{3.47}$$

is recovered to a very good approximation. Physically, this happens because the exchange term in (3.44) is significant at microscopic relative distances between the particles, but vanishes when this distances becomes macroscopic; therefore, by average over all possible positions of the second particle, the direct term becomes dominant.

3.3.2 Interacting dilute gas: first correction

Our purpose now is to introduce interactions and to examine how (3.38) and (3.44) are modified. We shall start from the simplest generalization [7] of the Beth Uhlenbeck formula introduced in [49]:

$$\begin{aligned}\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\rm gc} &= [\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\rm gc}]_{i.g.} + z^2\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{U_2\frac{1+\eta P_{\rm ex}}{2}\times[1+\eta f(1)]\times[1+\eta f(2)]\right\}\\ &= [\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\rm gc}]_{i.g.} + \mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\overline{U}_2\frac{1+\eta P_{\rm ex}}{2}\times f(1)\times f(2)\right\}\end{aligned} \tag{3.48}$$

where $[\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\rm gc}]_{i.g.}$ is the value obtained in the absence of interactions, given in (3.34); according to (3.20), the operator $\overline{U}_2$ is defined by:

$$\overline{U}_2 = U_2 \times [U_1(1)U_1(2)]^{-1} \tag{3.49}$$

[7] In the second line of (3.48), the factor z^2 appearing in the right hand side of the first line has been combined with the U_1's introduced by the substitution of $\overline{U}_2$ for U_2 in order to provide the two operators f's.

One particle density operator

The product $f(1)f(2)$ in the second line of (3.48) can be expanded according to:

$$f(1)f(2) = \sum_{n,p=1}^{\infty} [\eta z U_1(1)]^n \times [\eta z U_1(2)]^p \tag{3.50}$$

(we use the fact that $\eta^2 = 1$ for bosons and fermions) so that the variations of U_1 defined in (3.21) introduce a term equal to:

$$\text{Trace}_{1,2}\left\{\overline{U}_2 \frac{1+\eta P_{ex}}{2} \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{n-1} [\eta z U_1(1)]^k \eta z U_1(1) \mid 1:\varphi >< 1:\theta \mid [\eta z U_1(1)]^{n-1-k} \eta f(2)\right\} + id.(1 \leftrightarrow 2) \tag{3.51}$$

where $id.(1 \leftrightarrow 2)$ symbolizes the same expression with indices 1 and 2 exchanged. The summation over n can be replaced by a summation over $n' = n - 1 - k$ which introduces the operator:

$$\sum_{n'=0}^{\infty} [\eta z U_1(1)]^{n'} = 1 + \eta f(1) \tag{3.52}$$

while the summation over k introduces:

$$\sum_{k=0}^{\infty} [\eta z U_1(1)]^{k+1} = \frac{\eta z U_1(1)}{1 - \eta z U_1(1)} = \eta f(1) \tag{3.53}$$

Now, since:

$$f(1) = z U_1(1)\,[1 + \eta f(1)]$$

the factor $\eta f(2)$ in the right hand side of (3.51) and the $\eta f(1)$ from (3.53) can be inserted into $\overline{U}_2$ to provide the result $z^2 U_2\,[1 + \eta f(1)]\,[1 + \eta f(2)]$, which leads to:

$$2z^2 \langle \theta \mid [1 + \eta f(1)]\,\text{Trace}_2\left\{U_2 \frac{1+\eta P_{ex}}{2}\,[1 + \eta f(1)]\,[1 + \eta f(2)]\right\} \mid \varphi\rangle \tag{3.54}$$

(the factor 2 arises from the term $[1 \leftrightarrow 2]$). Finally we obtain:

$$\rho_I = f(1) + 2z^2\,[1 + \eta f(1)]\,\text{Trace}_2\left\{U_2 \frac{1+\eta P_{ex}}{2}\,[1 + \eta f(2)]\right\}[1 + \eta f(1)] \tag{3.55}$$

This equation is valid to first order in U_2.

The validity (3.55) does not require that the degree of degeneracy of the gas should be very low, but of course it can be applied to this particular case: in the limit of a non degenerate gas, the correction to ρ_I is simply obtained by replacing in (3.55) all

factors $[1+\eta f]$ by one. One can also expand these factors in powers of ηf, which provides the quantum corrections introduced by particle indistinguishability, starting with the term corresponding to a permutation between two particles, followed by the term introduced by cycles of three particles, etc.

Equation (3.55) is limited to interaction potentials with sufficiently small range b, a necessary conditions for the higher order corrections in $[U_2]^2$, $[U_2]^3$, etc. as well in any power of U_3, U_4, etc. to be negligible[8]; on the other hand, it is not a perturbative result with respect to the intensity of the interaction potential, which can take arbitrarily large values for small relative distances between particles (see for instance section 3.4 for a discussion of hard core potentials); in other words, the equation contains the effects of local perturbations on thermal equilibrium, even if they are strong.

Mathematically, U_2 is the difference between two exponential operators and, as such, contains all powers of the potential. In order to make contact with perturbation theories, it is of course possible to retain only the first order term from the V expansion of U_2, that is to replace $U_2(1,2)$ by:

$$U_2 \simeq -\int_0^\beta d\beta' U_1^{\beta-\beta'}(1) U_1^{\beta-\beta'}(2) V(1,2) U_1^{\beta'}(1) U_1^{\beta'}(2) \tag{3.56}$$

where:

$$U_1^{\beta''}(1) = e^{-\beta''\left[\mathbf{P}^2/2m + V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\right]} \tag{3.57}$$

and where $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ is the external potential. This yields:

$$\rho_I \simeq f(1) + 2f(1)\int_0^\beta d\beta' U_1^{\beta'}(1)\,\text{Trace}_2\left\{V(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2} f(2)\right\} U_1^{\beta'}(1)\,[1+\eta f(1)] \tag{3.58}$$

an equation which now requires the potential to be sufficiently small. In the case of fermions ($\eta = -1$) the diagonal element of ρ_I get a non zero correction only if the product $f(1)\,[1-f(1)]$ is non zero, where $[1-f(1)]$ can be interpreted as the distribution function of holes; as a consequence, the correction occurs only near the surface of the Fermi sphere, within an energy range of the order of kT, which is a familiar result[9]. The fact that (3.58) contains integral over the inverse temperature β' is characteristic of the results of perturbation theories [62, 63] (second order terms would contain a double integration over β' and β'', etc.), as opposed to our formalism where every U_2 contains a resummation of an infinite perturbation series which suppresses these summations.

Two particle density operator

We now insert (3.27) into (3.50) and look for the crossed terms in dx and dy. Several possibilities may arise, depending on whether the variations affect two U_1's corresponding to two different particles, or to the same particle. This introduces under

[8] See section 3.3.3 for a discussion of these terms.

[9] This remains true if the more general formula (3.55) is used, as can be seen by replacing $U_2\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]$ by the product $\overline{U}_2 f(1) f(2)$.

the double sum over n and p the following expression:

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=0}^{n-1} [\eta z U_1(1)]^k \, \eta z U_1(1) \mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid [\eta z U_1(1)]^{n-1-k} \times \\
&\qquad \times \sum_{k'=0}^{p-1} [\eta z U_1(2)]^{k'} \, \eta z U_1(2) \mid 2:\varphi_y\rangle\langle 2:\theta_y \mid [\eta z U_1(2)]^{p-1-k'} + \\
&+ \sum_{k=0}^{n-2} [\eta z U_1(1)]^k \, \eta z U_1(1) \mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid \sum_{k'=0}^{n-2-k} [\eta z U_1(1)]^{k'} \\
&\qquad \eta z U_1(1) \mid 1:\varphi_y\rangle\langle 1:\theta_y \mid [\eta z U_1(1)]^{n-2-k-k'} \, [\eta z U_1(2)]^p \\
&\qquad + \quad id.([1,n] \leftrightarrow [2,p]) + id.(x \leftrightarrow y)
\end{aligned} \tag{3.59}$$

where, in the last line, $id.([1,n] \leftrightarrow [2,p])$ originates from two variations in $U_1(2)$'s, which introduce a term equal to that contained in the two preceding lines with the substitutions indicated between brackets. Moreover, since the first operator which is varied can contain a variation in $\mid \varphi_x\rangle\langle\theta_x \mid$ as assumed explicitly in (3.59), or a variation in $\mid \varphi_y\rangle\langle\theta_y \mid$, one should add to all preceding results the same term with the substitution $(x \leftrightarrow y)$, as indicated in the second term of the last line. The rest of the calculation is similar to that of the preceding section: when independent summation indices replace n, p, k and k', the summations introduce either operators ηf's (when the index runs from 1 to infinity) or operators $[1+\eta f]$ (when it runs from 0 to infinity) so that (3.59) becomes:

$$\begin{aligned}
&\eta f(1) \mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid [1+\eta f(1)]\, \eta f(2) \mid 2:\varphi_y\rangle\langle 2:\theta_y \mid [1+\eta f(2)] + \\
&+ \eta f(1) \mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid \eta f(1) \mid 1:\varphi_y\rangle\langle 1:\theta_y \mid [1+\eta f(1)]\, \eta f(2) \\
&\qquad + id.(1 \leftrightarrow 2) + id.(x \leftrightarrow y)
\end{aligned} \tag{3.60}$$

According to (3.48), we now have to multiply this term by $\overline{U}_2$ and a symmetrization operator, and to take the trace over the variables of two particles. As in the calculation of ρ_I, it is convenient to move $\eta f(1)$ as well as $\eta f(2)$ towards $\overline{U}_2$, with which they combine to introduce the product $z^2 U_2 [1+\eta f(1)][1+\eta f(2)]$; doing this operation, for instance, in the term of the first line of (3.60) provides the result:

$$\begin{aligned}
z^2 \mathrm{Trace}_{1,2} \Big\{ & U_2^{S,A} [1+\eta f(1)] \mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid [1+\eta f(1)] \times \\
& \times [1+\eta f(2)] \mid 2:\varphi_y\rangle\langle 2:\theta_y \mid [1+\eta f(2)] \Big\}
\end{aligned} \tag{3.61}$$

which is simply equal to:

$$z^2 \langle \theta_x, \theta_y \mid [1+\eta f(1)][1+\eta f(2)] U_2^{S,A} [1+\eta f(1)][1+\eta f(2)] \mid \varphi_x, \varphi_y \rangle \tag{3.62}$$

where we have introduced the notation $U_2^{S,A}$ for the restriction of U_2 to the symmetric/antisymmetric space:

$$U_2^{S,A} = U_2 \frac{1+\eta P_{\mathrm{ex}}}{2} \tag{3.63}$$

(because the operator U_2 itself is already symmetric by exchange of the particles, in this definition the symmetrization projector $[1 + \eta P_{\text{ex}}]/2$ may arbitrarily be put on either side, or on both). Similarly, the second line of (3.60) introduces a contribution:

$$z^2 \langle \theta_x \mid \eta f(1) \mid \varphi_y \rangle \langle \theta_y \mid [1 + \eta f(1)] \, \text{Trace}_2 \left\{ U_2^{S,A} \, [1 + \eta f(2)] \right\} [1 + \eta f(1)] \mid \varphi_x \rangle \tag{3.64}$$

This can be written as a term containing a trace over a third particle:

$$z^2 \langle \theta_x, \theta_y \mid [1 + \eta f(1)] \, [1 + \eta f(2)] \, \text{Trace}_3 \left\{ U_2^{S,A}(2,3) \, [1 + \eta f(3)] \right\} \times \\ \times \, [1 + \eta f(2)] \, \eta P_{\text{ex}}(1,2) \mid \varphi_x, \varphi_y \rangle \tag{3.65}$$

which, according to (3.55) and (3.33), is nothing but an exchange term associated with the product of ρ_I's appearing in (3.33). Finally, if we include the contributions of the permutations in the third line of (3.60), our results concerning ρ_I and ρ_{II} can be summarized in the following equations, where we use the notation $1 \times U_2$ as a reminder that the present calculation is first order in U_2:

$$\begin{aligned} \rho_I(1) &= f(1) + \delta\rho_I(1) \\ \rho_{II}(1,2) &= f(1) \otimes f(2) \, [1 + \eta P_{\text{ex}}] + \delta\rho_{II}(1,2) \end{aligned} \tag{3.66}$$

with:

$$\delta\rho_I = \delta f \equiv 2z^2 \, [1 + \eta f(1)] \, \text{Trace}_2 \left\{ U_2^{S,A} \, [1 + \eta f(2)] \right\} [1 + \eta f(1)] \tag{3.67}$$

and:

$$\delta\rho_{II} = 2z^2 \, [1 + \eta f(1)] \, [1 + \eta f(2)] \, U_2^{S,A}(1,2) \, [1 + \eta f(1)] \, [1 + \eta f(2)] \\ + \, [1 + \eta P_{\text{ex}}] \, [f(1) \otimes \delta\rho_I(2)] \, [1 + \eta P_{\text{ex}}] \tag{3.68}$$

The latter result includes two kinds of contributions to $\delta\rho_{II}$; in the second line, we get a correction as a direct consequence of the modification of ρ_I under the effects of the interactions, but which contains no correlation between the particles, except of course the statistical correlation introduced by the operators $[1 + \eta P_{\text{ex}}]$ at each end; in the first line, we get a different kind of correction which may contain strong short range correlations created by the interactions, that is correlations that manifest themselves over a characteristic distance of the order of the potential range b (and not only of the order of the De Broglie wavelength). In section 3.4 we discuss these short range effects in more detail.

Otherwise, the remarks made after equation (3.55) apply without any change; for instance, (3.68) is a non perturbative result in term of the intensity of the interactions, but is valid only if the potential range b is sufficiently small; the limit of non degenerate gases is immediately obtained by suppressing all brackets $[1 + \eta f]$ in (3.67) and (3.68).

3.3.3 Second order in U_2

We now include the effect of the terms in Log $\mathcal{Z}_{gc}$ which are second order in U_2 and have been obtained in [49]. Their contribution has been found to be equal to the sum of two terms:

$$\frac{z^4}{2}\text{Trace}_{1,2}\left\{\left[U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\right]^2\right\} \tag{3.69}$$

and:

$$2\eta z^4\text{Trace}_{1,2,3}\left\{U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,U_2^{S,A}(1,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(3)]\right\} \tag{3.70}$$

Introducing the notation:

$$\overline{U}_2^{S,A}(1,2) = \overline{U}_2(1,2)\frac{1+\eta P_{ex}}{2} \tag{3.71}$$

we can rewrite (3.69) as:

$$\frac{1}{2}\text{Trace}_{1,2}\left\{\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1)f(2)\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1)f(2)\right\} \tag{3.72}$$

From now on, we focus the calculation to the two particle density operator, which contains the correlations between the particles and therefore the most interesting physical information. The f's may be expanded in U_1's as in (3.50); when the U_1's are varied, several kinds of situations may occur, depending whether the variations occur in close f's or f's separated by an $\overline{U}_2^{S,A}$, and whether the f's correspond to the same particle or not. Since all f's play the same role, we can assume that the variation in dx takes place in the first $f(1)$, and multiply the result by 4. There are now four possible cases, depending where the second variation is placed.

i) If the second variation occurs in the same $f(1)$, the term which appears is similar to that calculated in the third and fourth lines of (3.59), and we have to make the substitution:

$$f(1) \Rightarrow \eta f(1)\mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid f(1)\mid 1:\varphi_y\rangle\langle 1:\theta_y \mid [1+\eta f(1)] + id.(x\leftrightarrow y) \tag{3.73}$$

This leads to:

$$\begin{aligned}2\eta\langle\theta_x\mid f(1)\mid\varphi_y\rangle \times \text{Trace}_{1,2}\Big\{&\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1)\mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_y\mid \times\\ &\times[1+\eta f(1)]\,f(2)\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1)f(2)\Big\}\end{aligned} \tag{3.74}$$

But we also have to add the symmetric term $id.(x \leftrightarrow y)$, so that we get the following contribution to the two particle operator

$$2z^4 f(1)\,[1+\eta f(2)]\,\text{Trace}_3\left\{\left[U_2^{S,A}(2,3)\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\right]^2\right\}\eta P_{ex}(1,2) + (1\leftrightarrow 2) \tag{3.75}$$

where the term $(1 \leftrightarrow 2)$ is simply obtained from the preceding term by moving the exchange operator $P_{ex}(1,2)$ in front of the other operators. The contribution (3.75) is clearly an exchange term, which contains no dynamic correlation between the particles, but just correlations from statistics.

ii) If the variation occurs in the $f(2)$ which follows immediately the varied $f(1)$, both f's should be varied according to:

$$f \Rightarrow f \mid 1:\varphi_{x,y}\rangle\langle 1:\theta_{x,y} \mid [1+\eta f] \tag{3.76}$$

so that we obtain:

$$2\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1) \mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid [1+\eta f(1)]\, f(2)\times \right. \\ \left. \times \mid 2:\varphi_y\rangle\langle 2:\theta_y \mid [1+\eta f(2)]\, \overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1)f(2)\right\} \tag{3.77}$$

which leads to the following contribution:

$$2z^4\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\times \\ \times\,[1+\eta f(2)]\,U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \tag{3.78}$$

This is a second order generalization of the first line of (3.68), which contains no trace over a third particle; we expect that it will contain short range correlations for strongly repulsive potentials at short distances.

iii) If the second variation occurs in the other $f(1)$, equation (3.76) applies again and we obtain:

$$2\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1) \mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid [1+\eta f(1)]\, f(2)\times \right. \\ \left. \times\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1) \mid 1:\varphi_y\rangle\langle 1:\theta_y \mid [1+\eta f(1)]\, f(2)\right\} \tag{3.79}$$

and the following contribution to the two particle density operator:

$$2z^4\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,\mathrm{Trace}_3\left\{U_2^{S,A}(1,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(3)]\times \right. \\ \left. \times U_2^{S,A}(2,3)\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\right\} P_{\mathrm{ex}}(1,2) \tag{3.80}$$

The curious feature of this term is that it contains an exchange operator without a factor η; we will see other similar cases below.

iv) Finally, the variation may occur in the second $f(2)$, which from (3.76) leads to:

$$2\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1) \mid 1:\varphi_x\rangle\langle 1:\theta_x \mid [1+\eta f(1)]\, f(2)\times \right. \\ \left. \times\overline{U}_2^{S,A}(1,2)f(1)f(2) \mid 2:\varphi_y\rangle\langle 2:\theta_y \mid [1+\eta f(2)]\right\} \tag{3.81}$$

which gives the same contribution to ρ_{II} as the term (3.80).

Among all four terms that we have obtained, only (3.78) contains dynamical correlations between the particles, and no trace over a third interaction partner. This term will play an important role in the discussion of section 3.4.

We now have to apply the same kind of calculation to (3.70). The general method is exactly the same, but here we obtain 5 terms instead of 4: one term which contains a trace over a third particle with, inside the trace, only one U_2 operator; one term of the same kind but with two U_2's inside the trace; and finally three terms containing traces over two extra particles. As an example, we give one of these three terms, which is equal to:

$$4z^4 f(1)\,[1+\eta f(2)]\,\mathrm{Trace}_{3,4}\left\{U_2^{S,A}(2,3)\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\times \right.$$
$$\left.\times U_2^{S,A}(2,4)\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(4)]\,P_{\mathrm{ex}}(1,2)\right\}+$$
$$+\,id.\,[1\leftrightarrow 2] \qquad (3.82)$$

To save space, we do not write the other terms explicitly.

Finally, one must not forget to include the second order modifications of the product of $\rho_I \otimes \rho_I$ according to (3.33). They combine with the terms in $\eta P_{ex}(1,2)$ of (3.75) and the analog contribution derived from (3.70) in order to produce a symmetrizer/antisymmetrizer $[1+\eta P_{ex}(1,2)]/2$ in the same manner as for the first order calculation.

3.3.4 First order in U_3

In ref.[49] [*chapitre 2*], we obtain the following term for the first order contribution of U_3 to Log $\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$:

$$z^3\mathrm{Trace}_{1,2,3}\left\{U_3^{S,A}(1,2,3)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\,[1+\eta f(3)]\right\} \qquad (3.83)$$

where $U_3^{S,A}(1,2,3)$ is the properly symmetrized version of the three particle operator U_3:

$$U_3^{S,A}(1,2,3) = U_3(1,2,3)\begin{matrix}\mathrm{S}_3\\ \mathrm{A}_3\end{matrix} \qquad (3.84)$$

It is convenient to rewrite (3.83) in the form:

$$\mathrm{Trace}_{1,2,3}\left\{\overline{U}_3^{S,A}(1,2,3)\times f(1)\times f(2)\times f(3)\right\} \qquad (3.85)$$

and, as in (3.50), to expand each of the f's inside the product into a series of U_1's which will be varied. If both variations occur in U_1's originating from the same f, we use (3.73) and we are led to the following contribution to ρ_{II}:

$$3f(1)\otimes[1+\eta f(2)]\,\mathrm{Trace}_{3,4}\left\{U_3^{S,A}(2,3,4)\,[1+\eta f(3)]\,[1+\eta f(4)]\right\}[1+\eta f(2)]\,\eta P_{\mathrm{ex}}+\mathrm{h.c.} \qquad (3.86)$$

where h.c. symbolizes the hermitian conjugate operator, with P_{ex} in front of the product of operators instead of at the end. This term is similar to (3.75) and reminiscent of the exchange terms in ρ_{II} for an ideal gas.

If the variations of the U_1 occur in operators originating from two different f's, we use (3.76) and we are led to the following contribution to the two particle density operator:

$$6z^3\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \times \mathrm{Trace}_3\left\{U_3^{S,A}(1,2,3)\,[1+\eta f(3)]\right\} \times [1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \tag{3.87}$$

which is a direct generalization of the first line of the right hand side of (3.68); as this term, it contains dynamical correlations at short distances.

Of course, as for U_2, there are terms in ρ_{II} that are second order in U_3 third order, etc. as well as terms depending of the higher order Ursell operators U_l; nevertheless, for a gas, we will see that the terms that we have already explicitly written are sufficient for a good description of the correlations.

3.4 Effects of a strong repulsion with short range

We now study the properties of the partial density operator ρ_{II} for a potential with a strong repulsive core. For the sake of simplicity, we will often assume a hard sphere potential of spatial extension b:

$$V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \begin{cases} \infty & \text{for } r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| < b \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{3.88}$$

but most of our calculations are in fact more general, b being defined as the distance between particles at which the interaction potential becomes significantly larger than the thermal energy k_BT. We know that the two body density operator:

$$\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2 \mid \rho_{II} \mid \mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2' \rangle \tag{3.89}$$

must necessarily vanish whenever either the distance $\mid \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \mid$, or $\mid \mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2' \mid$, (or both) becomes inferior to b. This is because, if we call $\mid \Psi_k >$ the eigenstates of the N particle hamiltonian H_N:

$$H_N \mid \Psi_k \rangle = E_k \mid \Psi_k \rangle \tag{3.90}$$

and $\Psi_n(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,...\mathbf{r}_N)$ the associated wave functions, the matrix elements of ρ_{II}^{can} can be expressed as:

$$\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2 \mid \rho_{II}^{can} \mid \mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2' \rangle = \int d^3r_3 ..... \int d^3r_N \sum_n e^{-\beta E_n} \Psi_n(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,...\mathbf{r}_N) \times \\ \times \Psi_n^*(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2',\mathbf{r}_3',...\mathbf{r}_N') \tag{3.91}$$

where the wave functions vanish exponentially in any region of configuration space where the potential energy exceeds their energy (in the limit of infinite potential and

hard cores, they vanish exactly whenever two hard cores overlap); therefore, if either $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ or $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'|$ is less than b (or both), the corresponding matrix elements of ρ_{II}^{can} have to vanish. It is straightforward to extend this result to the grand canonical version ρ_{II} of the two particle density operator.

Such a cancellation is a non-perturbative property of the two particle density operator : at zero relative distances, however small the potential range b is, the correction brought by the interactions to the ideal gas expression of ρ_{II} remains finite: it has to exactly compensate for the zero order term. On the other hand, nothing similar occurs for the one particle density operator, which undergoes only perturbative changes. Mathematically speaking, hard core potentials introduce a non-analytical expression of the potential energy, and the limit of the matrix elements of ρ_{II} at short distances is obtained in a non-uniform convergence process. It is therefore an interesting test of our method to see how this result is recovered, and indeed we will see that the process is not trivial.

In what follows we limit ourselves to the proof of this non-perturbative cancellation: we look for all short range corrections in ρ_{II} that are of zero order in b and ignore all higher order corrections. What we have to do, then, is to consider the whole series of terms of the Ursell expansion of ρ_{II} and identify the terms of zero order in b; fortunately, it turns out that only a small numbers of the Ursell diagrams contribute, namely those of zero, first and second order in U_2 as well as first order in U_3. As in section 3.3.2 above, we start the analysis from the terms which are zero order in U_2.

3.4.1 Zero order term in U_2

In a system with translational invariance (periodic boundary conditions), ρ_{II} commutes with the sum of the momenta of the two particles, which means that all its matrix elements are diagonal with respect to this sum. We therefore have:

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid \rho_{II} \mid \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle = \mathcal{V}^{-2} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} e^{i\left[\mathbf{q}'\cdot(\mathbf{r}_1'-\mathbf{r}_2')-\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\right]} \times \times \langle \frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}, \frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q} \mid \rho_{II} \mid \frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{q}', \frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{q}' \rangle \tag{3.92}$$

where $\mathcal{V}$ is the volume of the system (which arises from the normalization of the plane waves). This general formula can readily be applied to an ideal gas; from (3.44), where the operators f are diagonal in the momentum representation, we obtain a direct term where $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$, followed by an exchange term where $\mathbf{q} = -\mathbf{q}'$, so that the sum is:

$$\int d^3k_1 \int d^3k_2 \; f(\mathbf{k}_1) f(\mathbf{k}_2) \left[e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1'+\mathbf{r}_2'\right)/2} + \eta e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\left(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_1'-\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_2'\right)/2} \right] \tag{3.93}$$

If for instance we consider only the diagonal elements of ρ_{II} ($\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1'$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2'$), we see that the only spatial dependence arises from the exchange term (term in η inside

the bracket). More generally, in equation (3.93), the only characteristic length is the thermal wavelength introduced by the functions f:

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \tag{3.94}$$

and no special variation occurs when $|\,\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\,|$ or $|\,\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'\,|$ becomes smaller than b; the result is, of course, independent of b, which makes it zero order in b for any value of the $\mathbf{r}$'s. In the following calculation, therefore, our purpose will be to find in the Ursell expansion series the terms which will compensate for the short range value of (3.93) and to check that no other zero order term has been omitted.

3.4.2 First order in U_2

Preliminary considerations

In order to simplify the discussion of the other terms, we first make a few remarks about the characteristic lengths involved in the matrix elements of some relevant operators. We start from the elements of U_2 itself:

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | U_2(1,2) | \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \tag{3.95}$$

In this element, if the distance between two particles (in the bra or in the ket) is smaller than the potential range b, the application of the operator $\exp[-\beta\,(H_0(1,2) + V(1,2))]$ gives zero; this is easily checked by a reasoning similar to that based on equation (3.91). In this case, inside (3.95), U_2 "reduces" according to:

$$U_2(1,2) = e^{-\beta[\mathfrak{H}_0(1,2)+V(1,2)]} - e^{-\beta\mathfrak{H}_0(1,2)} \Rightarrow -e^{-\beta\mathfrak{H}_0(1,2)} = -U_1(1)U_1(2) \tag{3.96}$$

Therefore, if at least one of the lengths $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ and $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'|$ is smaller than b, that is "inside hard cores", we have:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | U_2(1,2) | \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle &= -\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid U_1(1)U_1(2) \mid \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \\ &= -[\lambda_T]^{-6} e^{-\left[\pi\left(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1'\right)/\lambda_T\right]^2} e^{-\left[\pi\left(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2'\right)/\lambda_T\right]^2} \end{aligned} \tag{3.97}$$

Obviously, this matrix element is zero order in b (it is actually completely independent of the potential range); it has significant values as long as the differences $|\,\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1'\,|$ and $|\,\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2'\,|$ are not much larger than the thermal wavelength λ_T.

For a more detailed study, since the motion of the center of mass factorizes inside U_2, it is convenient to introduce the variables $\mathbf{R}$ of the center of mass and $\mathbf{r}$ of the relative motion and to write:

$$\langle \mathbf{R}, \mathbf{r} \mid U_2(1,2) \mid \mathbf{R}', \mathbf{r}' \rangle = 2^{3/2} [\lambda_T]^{-3} e^{-\left[2\pi\left(\mathbf{R} - \mathbf{R}'\right)/\lambda_T\right]^2} \langle \mathbf{r} \mid U_2^{\mathrm{rel}} \mid \mathbf{r}' \rangle \tag{3.98}$$

where U_2^{rel} is given in terms of the operator $\mathbf{P}$ associated with the relative momentum by:

$$U_2^{\text{rel}} = e^{-\beta\left[\frac{\mathbf{P}^2}{m}+V_{12}(\mathbf{r})\right]} - e^{-\beta\left[\frac{\mathbf{P}^2}{m}\right]} \tag{3.99}$$

We have:

$$\langle \mathbf{r} \mid U_2^{\text{rel}} \mid \mathbf{r}' \rangle = \sum_k e^{-\beta e_k} \varphi_k(\mathbf{r}) \left[\varphi_k(\mathbf{r}')\right]^* - \sum_k e^{-\beta e_k^o} \varphi_k^o(\mathbf{r}) \left[\varphi_k^o(\mathbf{r}')\right]^* \tag{3.100}$$

where the e_k and the $\varphi_k(\mathbf{r})$ are the energies and the eigenfunctions of the hamiltonian $\mathfrak{H}_{\text{rel}}$ describing the relative motion in the presence of the interaction potential, while the same notations with an extra upper index zero are the corresponding quantities in the absence of interaction[10]. Equation (3.98) shows that the $\mathbf{R}$ and $\mathbf{R}'$ dependence are the same as for an ideal gas, explicitly given in (3.97); on the other hand, the $\mathbf{r}$ and $\mathbf{r}'$ dependence is more complicated since, according to (3.100), it involves a difference of two exponential operators. We already know from the discussion above that, if $\mathbf{r}$ or $\mathbf{r}'$ (or both), are smaller than b, U_2^{rel} merely reduces to the second term of (3.100), associated to a free relative motion, so that the matrix element becomes zero order in b. Let us assume then that $\mathbf{r}'$ is fixed to some value, for instance of the order of λ_T, and that $\mathbf{r}$ increases progressively from zero. In three dimensions, the perturbation of the eigen wave functions of the hamiltonian, introduced by a short range potential, is limited within a region[11] of size comparable to the range. As a consequence, we expect that the matrix element of U_2^{rel} will remain of zero order in b only within a domain of dimension comparable to b (or some relatively small multiple of this length). If, on the other hand, $\mathbf{r}$ increases beyond this domain, the matrix elements will decrease (in absolute value) and become first order in b, for instance proportional to b/λ_T; in other words, sufficiently far from the origin they tend uniformly towards zero when b tends to zero, as opposed to what happens when $\mathbf{r}$ is comparable to b.

Since the two variables $\mathbf{r}$ and $\mathbf{r}'$ play a symmetric role in the discussion, we may summarize this discussion by saying that the matrix elements of U_2 are first order in b everywhere except in regions of the configuration space where either $\mid \mathbf{r} \mid$, or $\mid \mathbf{r}' \mid$, or both, are of the order of the potential range b.

We now assume that, inside (3.95), we insert an operator f, for instance on the right hand side of U_2, so that we study the matrix element:

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \,|U_2(1,2)f(1)|\, \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle = \int d^3r \; \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | U_2(1,2) | \mathbf{r}_1' + \mathbf{r}\,, \mathbf{r}_2' \rangle \; \langle \mathbf{r}_1' + \mathbf{r} | f | \mathbf{r}_1' \rangle \tag{3.101}$$

We first note that, if $\mid \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \mid \leq b$, this matrix element is zero order in b since U_2 reduces to a product of U_1's as in (3.96); the dependence in $\mid \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \mid$ is therefore of the

[10] For simplicity and compactness of the notation we assume a finite volume and do not distinguish explicitly the discrete (bound) spectrum from the continuum

[11] This property arises from the fact that the three dimension problem is equivalent to a one dimension problem with a boundary condition which always cancels the fictitious wave function at the origin, even in the absence of a potential; this phenomenon does not take place for lower dimension problems.

same type as that obtained in the absence of an operator f. But if $|\ \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\ |$ has much larger values, for instance of the order of λ_T, the dependence in $|\ \mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'\ |$ is drastically affected by the intermediate operator f: however small $|\ \mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'\ |$ is, the matrix elements never come back to zero order in b . To show this, we remark that, as for U_1, the only characteristic length which occurs in f is the thermal wavelength λ_T, which is necessarily much larger than b if this latter length tends to zero. In other words, in the integration over d^3r of (3.101), the second matrix elements has significant values in a range centered around the origin and of size comparable to λ_T; one may see this as the result of a "delocalization" of particle (1) in the ket produced by the operator f. As for the first matrix element, it has two characteristic lenghts, b and λ_T, so that we must distinguish in the integration domain two contributions: first, that arising from a volume comparable to b^3 around the value $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'$, which obviously gives a contribution of third order[12] in b which we can ignore here; second, that arising from the rest of the volume where the function to be integrated itself is first order in b. The net result is that, provided $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ is sufficently large, however small $|\ \mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'\ |$ is, the matrix element (3.101) always remains of first order in b and tends uniformly to zero when the potential range decreases. To make it zero order in b necessitates that the distance of the particles in the bra which touches directly U_2 is allowed to become very small. By symmetry, it is straightforward to obtain similar results for an operator f acting on the left of an operator U_2; it is sufficient to interchange the bras and the kets in the reasoning.

Finally, if we consider the matrix element:

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\, | f(1) U_2(1,2) f(1) | \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \tag{3.102}$$

or:

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\, | f(2) U_2(1,2) f(1) | \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \tag{3.103}$$

A simple generalization of our reasoning shows that, since the bras and kets where the positions of the particles are fixed are never in direct contact with U_2 (but only through f operators that delocalize them over about λ_T), the matrix elements are always at least of first order in b; they tend uniformly towards zero with b everywhere. Moreover, all preceding results apply without any change when U_2 is replaced by $U_2^{S,A}$ which, according to (3.63), contains an extra operator P_{ex}; this is because the exchange operator changes the sign of the vector $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ but not its length. To summarize, zero order terms in b can only be obtained when the $U_2^{S,A}$ operator is in direct contact with the ket, or the bra, where two particles are at a short distance (of the order of b).

Contribution to ρ_{II}

We now apply the preceding results to equations (3.66)-(3.68). Two types of corrections are present in ρ_{II}, those which appear through changes of ρ_I and contain no dy-

[12]The volume where the matrix element of U_2 is first order in b does not have to be precisely proportional to b^3 for our reasoning to be valid; it could vary more slowly, as $b\,[\lambda_T]^2$ for instance, without affecting our results.

namical correlations, and those which are given by (3.68) which do contain such correlations. It is natural to expect that the former do not play a role in the present discussion, and this is indeed the case because they contain a trace over a collision partner which makes them at least first order in b. Mathematically we have:

$$\langle \mathbf{r}_1 \left| \text{Trace}_2 \left\{ U_2^{S,A} \left[1 + \eta f(2) \right] \right\} \right| \mathbf{r}_1' \rangle = \int d^3 r_2 \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \left| U_2^{S,A} \left[1 + \eta f(2) \right] \right| \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2 \rangle \tag{3.104}$$

Since an integration over a variable $d^3 r_2$ is involved, the situation is similar to that found in (3.101): one may distinguish two domains of integration, one where the matrix elements are zero order but which has a volume tending to zero with b, and one where the matrix elements themselves tend to zero, so that the sum is at least first order in b. So, we only have to include (3.68) in our zero order reasoning. We now distinguish between three cases:

i) If $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'| \leq b$ while $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ is much larger, according to what has been said in §3.4.2, the zero order terms inside (3.68) are obtained by suppression of the f operators from the brackets $[1 + \eta f]$'s on the right of $U_2^{S,A}$; this is because the operators f's would introduce, according to (3.101), corrections that tend uniformly to zero when b tends to zero. Under these conditions the matrix elements we obtain are those of:

$$2z^2 \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \left| \left[1 + \eta f(1) \right] \left[1 + \eta f(2) \right] U_2^{S,A}(1,2) \right| \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \tag{3.105}$$

But, since U_2 reduces to a product of U_1's according to (3.96), we merely obtain the result:

$$-\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \left| f(1) f(2) \left[1 + \eta P_{ex} \right] \right| \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \tag{3.106}$$

which shows that the ideal gas term (3.44) is exactly cancelled by this term; we therefore obtain the expected cancellation of the matrix element of ρ_{II} in this case.

ii) If $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \leq b$ while $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'|$ is much larger, the reasoning is exactly similar to that of i), except that one has to interchange bras and kets. In this case also, the first order terms in U_2 are exactly opposed to the zero order terms and the matrix elements of ρ_{II} vanish as required.

iii) If $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ and $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'|$ are both smaller than b, in order to provide zero order contributions in b, the reduction process of $U_2^{S,A}$ may occur, either from the bra or from the ket (or both) . We may therefore keep the factors $[1 + \eta f(1)] [1 + \eta f(2)]$ either on the right, or on the left of the operator $U_2^{S,A}$, but in doing so we double count the term where all brackets $[1 + \eta f]$ are replaced by one, so that it is necessary to remove this contribution. The total result

is therefore:

$$\begin{aligned} 2z^2\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \left| [1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\, U_2^{S,A}(1,2) \right| \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2\rangle + \\ +2z^2\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \left| U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)] \right| \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2\rangle - \\ -2z^2\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \left| U_2^{S,A}(1,2) \right| \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2\rangle \end{aligned} \tag{3.107}$$

which is equal to:

$$\begin{aligned} -2\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \,| f(1)f(2)\,[1+\eta P_{ex}] |\, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2\rangle \\ + z^2\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \,| U_1(1)U_1(2)\,[1+\eta P_{ex}] |\, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2\rangle \end{aligned} \tag{3.108}$$

Therefore, in the case where the hard cores of the particles overlap in both the bra and the ket, the zero order cancellation with (3.44) is no longer obtained; we will see that higher order terms are needed to restore it.

3.4.3 Next terms

We have seen in the preceding section that taking into account only diagrams with at most one U_2 is not sufficient for describing the short range properties of ρ_{II} correctly. We will search now for other terms, derived from other diagrams, which give a contribution of order b^0 to ρ_{II}, in order to see whether, by this way, we can obtain a faithful description of what happens at short interparticle distances.

Second order in U_2

We now consider the contribution of the diagrams with two U_2's given in section 3.3.3. The first term we study is given by (3.78). We are searching for a contribution of zero order in the potential range, which can only be done by reducing each of the two U_2's into two U_1's; this means that both U_2's must act directly on bras or kets where two particles are close (we have seen in the preceding section that every f operating on a two particle wave function delocalizes one of the particles, which introduces a supplementary order in b). Hence, from (3.78), we keep only the contribution:

$$2z^4 U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\, U_2^{S,A}(1,2) \tag{3.109}$$

Therefore, if $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ and $|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2|$ are both smaller than b, we have to add to (3.108) the following contribution:

$$z^2\,\langle \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 \,| f(1)f(2)U_1(1)U_1(2)\,[1+\eta P_{ex}(1,2)] |\, \mathbf{r}'_1\mathbf{r}'_2\rangle \tag{3.110}$$

On the other hand, if $|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2| \leq b$ while $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ is much larger, or the reverse, we have no extra term to add to (3.106).

As for the term given in (3.75), it involves a trace over a third particle and can be ignored. This is because one can show – following the same line as in the previous section – that the trace introduces a supplementary order in b. The reasoning can be

generalized: any trace over a third particle gives a contribution which is of at least order b, as long as there is no permutation operator inside the trace which transposes the two particles ρ_{II} is operating on (see the discussion of the terms with one U_3 later in this section). Hence, we will be able to drop all terms with a trace, so that the only contribution to ρ_{II} of the diagrams with two U_2 in the order considered arises when the particles both in the bra and the ket are closer than b, and is then given by the expression derived above (3.110).

First order in U_3

The next terms of the Ursell series expansion of ρ_{II} are the contribution to Log $\mathcal{Z}_{gc}$ coming from the diagrams containing one single U_3, which we have obtained in section 3.3.4. Since both (3.86) and (3.87) involve a trace over (at least) one extra particle, at first sight, one might infer from the discussion of the preceding section that they introduce only matrix elements that tend uniformly towards zero with b. We will see that this is not true, and that some new zero order contribution is introduced by the exchange terms.

We start with the second term (3.87) which contains only one trace, so that it is more likely to leave a zero order contribution. As in the preceding section, we can ignore the f's acting at both ends on particle 1 or 2, since they correspond to terms which tend to zero with b, so that the matrix element becomes:

$$6z^3 \left\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \text{Trace}_3 \left\{ U_3^{S,A}(1,2,3) \left[1 + \eta f(3)\right] \right\} | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 \right\rangle \tag{3.111}$$

How can U_3 reduced in this term to give a zero order contribution? The operator U_3 is defined as:

$$U_3 = e^{-\beta \mathfrak{V}(1,2,3)} - [U_1(1)U_2(2,3) + \text{permutations}] - U_1(1)U_1(2)U_1(3) \tag{3.112}$$

If two particles, for instance 1 and 2, are at a distance smaller than b inside either a bra or a ket on which U_3 acts, the cancellation of the three body wave functions inside hard cores allow us to ignore the term in $e^{-\beta \mathfrak{V}(1,2,3)}$ and to reduce one of the U_2's so that U_3 becomes:

$$U_3 \to -U_1(1)U_2(2,3) - U_1(2)U_2(1,3) \tag{3.113}$$

If, in addition, we assume that in either the bra or the ket the distance between particle 3 and particle 2 is smaller than b, the operator U_3 is further reduced according to:

$$U_3 \to U_1(1)U_1(2)U_1(3) - U_1(2)U_2(1,3) \tag{3.114}$$

We note that the first term is indeed of order zero in b, whereas we cannot make any general statement about the second term (as long as we do not specify anything about the distance between the first and the third particle).

We can now return to (3.111) and develop the symmetrizer/antisymmetrizer according to:

$$\frac{1}{6}\{1+\eta\left[P_{ex}(1,2)+P_{ex}(1,3)+P_{ex}(2,3)\right]+C_3(1,2,3)+C_3(1,3,2)\} \quad (3.115)$$

and examine the terms one by one, assuming that particles 1 and 2 are close (in the bra):

i) The direct term:

$$z^3\,\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|\mathrm{Trace}_3\,\{U_3(1,2,3)\,[1+\eta f(3)]\}\,|\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2'\rangle \quad (3.116)$$

can be reduced once to:

$$-z^3\,\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|\mathrm{Trace}_3\,\{[U_1(1)U_2(2,3)+U_1(2)U_2(1,3)]\,[1+\eta f(3)]\}\,|\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2'\rangle \quad (3.117)$$

but not further; the trace over the third particle introduces an order b by the same process as in the discussion of U_2-terms. The contribution of the direct term therefore vanish to zero order in b, whatever the positions of particles 1 and 2 are.

ii) The term where particles 1 and 2 are exchanged:

$$\eta z^3\,\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|\mathrm{Trace}_3\,\{U_3(1,2,3)P_{ex}(1,2)\,[1+\eta f(3)]\}\,|\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2'\rangle \quad (3.118)$$

which, after a first reduction, becomes:

$$-\eta z^3\,\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|\mathrm{Trace}_3\,\{[U_1(1)U_2(2,3)+U_1(2)U_2(1,3)]\,|\,P_{ex}(1,2)\,[1+\eta f(3)]\}\,|\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2'\rangle \quad (3.119)$$

Here again we cannot reduce U_3 anymore, since both U_2's act on the third particle over which the trace is taken. For the same reasons as before, this leads to a negligible contribution.

iii) The terms where the third particle is exchanged with particle 1 or 2; the former term is given by:

$$\eta z^3\,\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|\mathrm{Trace}_3\,\{U_3(1,2,3)\;P_{ex}(1,3)\;\;[1+\eta f(3)]\}\,|\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2'\rangle \quad (3.120)$$

Assuming that particle 1 and 2 are close in the bra, we apply (3.113) and obtain, by inserting a closure relation and making the trace over the third particle explicit:

$$-\eta z^3\int d^3r_3\;\;d^3r\,\langle \mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\mathbf{r}_3\;|\;[U_1(1)U_2(2,3)+U_1(2)U_2(1,3)]\;|\;\mathbf{r},\mathbf{r}_2',\mathbf{r}_1'\rangle\times \times\,\langle \mathbf{r}\;|\;[1+\eta f]\;|\;\mathbf{r}_3\rangle \quad (3.121)$$

The term in $U_1(1)U_2(1,3)$ does not introduce any zero order contribution since there is no way to reduce $U_2(1,3)$, whatever values we choose for $\mathbf{r}_1'$ and $\mathbf{r}_2'$; we therefore ignore it. However, the term in $U_1(1)U_2(2,3)$ can indeed be reduced from the right hand side by assuming that $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'| \leq b$, leading to the result:

$$\eta z^3 \langle \mathbf{r}_1 \mid U_1 [1+\eta f] U_1 \mid \mathbf{r}_1' \rangle \langle \mathbf{r}_2 \mid U_1 \mid \mathbf{r}_2' \rangle = \eta z^2 \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid U_1(1)U_1(2)f(1) \mid \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \quad (3.122)$$

which is of the required order zero.

Obviously the term in $P_{ex}(2,3)$ of (3.115) leads to a similar contribution, where the indices 1 and 2 are exchanged. We therefore have to add the following zero order contribution to ρ_{II}:

$$\eta z^2 U_1(1)U_1(2)[f(1)+f(2)] \quad (3.123)$$

iv) The cyclic permutation terms, of which the first one is given by:

$$z^3 \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid \mathrm{Trace}_3 \{U_3(1,2,3)C_3(1,2,3)[1+\eta f(3)]\} \mid \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \quad (3.124)$$

which, according to (3.113), becomes if $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \leq b$:

$$-z^3 \int d^3r_3\, d^3r \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \mid [U_1(1)U_2(2,3) + U_1(2)U_2(1,3)] \mid \mathbf{r}_2', \mathbf{r}, \mathbf{r}_1' \rangle \times \times \langle \mathbf{r} \mid [1+\eta f] \mid \mathbf{r}_3 \rangle \quad (3.125)$$

If, in addition, $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'| \leq b$, by the same argument as in (iii) we keep only the term in $U_2(1,3)$ which reduces into $U_1(1)U_1(3)$; this provides the result:

$$z^2 \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid U_1(1)U_1(2)f(2)P_{\mathrm{ex}}(1,2) \mid \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle \quad (3.126)$$

Adding the equivalent contribution from the term in $C_3(1,3,2)$, we obtain the contribution to ρ_{II} as:

$$z^2 U_1(1)U_1(2)[f(1)+f(2)]P_{ex}(1,2) \quad (3.127)$$

The sum of all corrections to ρ_{II} that we have obtained in this section is:

$$z^2 U_1(1)U_1(2)[f(1)+f(2)][\eta + P_{ex}(1,2)] \quad (3.128)$$

which is valid whenever $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \leq b$ and $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'| \leq b$. On the other hand, if any of the distances $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ or $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'|$ is much larger than b (or both), there is no way to reduce all U_2's and no new zero order term appears.

The other contribution to ρ_{II} originating from first order in U_3 is given by (3.86) and contains the trace over two extra particles. While it was possible to cancel the effect of one extra trace in (3.87) by taking into account exchange operators, one can easily convince oneself that two traces are too many and that at least one trace over a U_2 operator will survive. All these terms tend to zero with b and we may ignore them.

We conclude that the only term arising from diagrams with one U_3 which survives the reduction of ρ_{II} to zero order zero in b is (3.128); it contributes to ρ_{II} only when the inter particle distances in both the bra add the ket are smaller than b.

Higher order terms

We have not studied terms which are more than second order in U_2 or first order in U_3. However, this is not necessary as long as we limit the calculations to zero order in b. For instance, any contribution from diagrams with more than two U_2's will contain more second order operators than it is possible to reduce by choosing close positions for two particles inside the bra and the ket; this is for example the case for the higher order contributions resummed by ladder diagrams [*cf.* 3.6]. The same conclusion applies to second, third, etc. order in U_3: we have seen that it is necessary to reduce U_3 twice, that is once from each side, in order to obtain a term which involves U_1's only, and completely reducing two independent U_3's is not possible. Generalizing to higher order Ursell operators, we may notice that in each term of the Ursell series expansion, we have to reduce all U_l's to l U_1 operators, in order to obtain contributions of zero order in b. As we have at maximum two correlated particle pairs (in the bra and the ket) for reduction, it is clear that higher order terms (U_4, $2 \times U_3$, etc.) cannot be reduced completely to U_1's.

Therefore, the terms that we have calculated so far are sufficient for the study of the zero order properties of ρ_{II}. Of course, if we were interested in higher order correlations between the particles, we would have to consider higher order partial density operators ρ_{III}, ρ_{IV}, etc. and the situation would be different: with more position variables in the bra and the ket, it would be possible to reduce more efficiently U_l operators than inside ρ_{II}, and to block more trace operations. Consequently, more complex diagrams would play a role to zero order in b when the distance between all particles in the bra and the ket is smaller than the potential range.

3.4.4 Summary

To summarize, if either $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ or $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'|$ is much smaller than b (but not both), the first order U_2 calculation which provides (3.68) is sufficient since it ensures a proper cancellation of ρ_{II} when we add it to the ideal gas term (3.44). On the other hand, if both $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ and $|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'|$ are smaller than b, the situation is more complex and we have to add the corrections given in equations (3.108), (3.110) and (3.128); the overall result is:

$$\left\{-2f(1)f(2) + z^2U_1(1)U_1(2)\left[1 + f(1)f(2) + \eta f(1) + \eta f(2)\right]\right\} \times \left[1 + \eta P_{\text{ex}}\right] \tag{3.129}$$

which, when added to (3.44), gives exactly zero, as readily seen from the relation:

$$f = zU_1\left[1 + \eta f\right] \tag{3.130}$$

This shows that the matrix elements of ρ_{II} vanish exactly inside hard cores, as expected, and that the sum of the three corrections gives a correct treatment of non-perturbative effects inside the potential; one can therefore expect that this expression provides a good description of the short range properties of ρ_{II}. It is interesting that the cancellation of the matrix elements requires adding to the first and second order U_2

terms a contribution arising from a rather subtle exchange effect inside the U_3 term, corresponding to cyclic exchange or to exchange with an interaction partner.

To summarize, a good approximation to the two body density operator ρ_{II}, which includes perturbative effects at long relative distances between the particles as well as non-perturbative effects at short distances, is given by the following expression:

$$\rho_{II} = [f(1) + \delta f(1)] \otimes [f(2) + \delta f(2)] [1 + \eta P_{\text{ex}}] + \\ + [1 + \eta f(1)] [1 + \eta f(2)] F(1,2) [1 + \eta f(1)] [1 + \eta f(2)] \quad (3.131)$$

where δf is the operator defined in (3.67) and where:

$$F = 2z^2 U_2^{S,A} + 2z^4 U_2^{S,A} [1 + \eta f(1)] [1 + \eta f(2)] U_2^{S,A} \\ + 6z^3 \text{Trace} \left\{ U_3^{S,A}(1,2,3) \ [1 + \eta f(3)] \right\} \quad (3.132)$$

3.5 Conclusion

The U-C diagram method provides explicit expressions for the partial density operators, including non-perturbative effects; this is seen in equations (3.66), or the more precise approximation (3.131), which are the main results of the present article. The expressions remain relatively compact, at least when the calculation is limited to first order in the Ursell operators. The two body density operator gives physical information on the correlations between particles; the operator can be used to calculate, for instance, the amount of light scattered by a gaseous sample,[13] or of density corrections to the index of refraction of a degenerate gas of bosons [72]. But other calculations are also possible; for instance, from the one body density operator one can calculate average kinetic energy of the particles, from the two body density operator the average potential energy, so that it is possible to get information on how the total energy is shared into its two components. Of course, for an exact calculation including all Ursell operators to all orders, the sum of the two energies should reconstruct exactly the "macroscopic" energy obtained by derivation of $\text{Log}\, \mathcal{Z}_{\text{gc}}$ with respect to the inverse temperature. But, for approximate calculations, this is not necessarily the case, so that the two calculations of energy give a convenient way to evaluate the quality of the approximations made in the calculations. Another check is given by the calculation of the pressure from the expression of its exact microscopic operator [73]; ideally, the average value of this operator over ρ_{II} should reconstruct the macroscopic value $[kT\, \text{Log}\, \mathcal{Z}_{\text{gc}}] / \mathcal{V}$, so that deviations from this rule are a convenient guide in the approximations. Finally, the knowledge of ρ_{II} could be useful as a tool for understanding the physical origin of complex phenomena such as the superfluid transition in gases, a subject that we are planning to investigate in future work.

It is also possible to take a point of view which is completely different from that in the present article, where the Ursell operators are known differences between exponentials of hamiltonians, and to consider them as unknown operators which will be

[13] The second order term of the intensity of the scattered light depends on the density–density correlation function ([71: §117]).

determined according to variational principles. The N body density operator at thermal equilibrium is given by:

$$\rho_N = \frac{1}{Z_N} K_N \tag{3.133}$$

where K_N is defined by the exact expression(3.18); now, this expression can also be truncated to the terms leading to some approximation for Log $\mathcal{Z}_{gc}$ (first order approximation terms in U_2 for instance, or second order in U_2 with first order U_3, etc.) while the U_l are now left free to vary, instead of being fixed. This provides a variational ρ_N or, by a simple generalization, a variational expression of the many particle density operator in the grand canonical ensemble. Now, since the expressions of the partial density operators that we have written allow an exact evaluation of the energy (or of the pressure, i.e. the grand potential), one can then determine the U_l's that make these expressions stationary. In this way one gets a variational method, valid at zero temperature, which provides approximate values of the ground state energy of the system. Of course, if no truncation had been in (3.18), the method should simply lead to the initial definition of the U_l's (at zero temperature) and to the exact energy. On the other hand, a truncation will in general lead to different expressions of the U_l's; for instance, if the operators of order more than 2 are ignored, the changes in the value of U_2 will tend to make up for the omission of U_3, etc. An interesting feature of the method is that is would automatically provide the next step in the variational method: inserting more U-C diagrams in the expression of Log $\mathcal{Z}_{gc}$. The extension to non zero temperature can also be envisaged, by calculating the microscopic expression of the pressure and making it stationary, but the practical usefulness of this possibility has not yet been examined.

Appendix 3.A

Instead of varying the first Ursell operator U_1, as in the text, we can also obtain reduced density operators by varying the interaction potential. Let us assume that V_{ij} gets the following variation:

$$V_{ij} \Rightarrow V_{ij} + \beta^{-1} dx \mid i : \varphi_a ; j : \varphi_b \rangle \langle i : \theta_a ; j : \theta_b \mid \tag{3.134}$$

Circular permutations under the trace allow us to write:

$$\begin{aligned} dZ_N &= dx \ \mathrm{Trace}_{1,2,\ldots N} \left\{ \sum_{i<j} \mid i : \varphi_a ; j : \varphi_b \rangle \langle i : \theta_a ; j : \theta_b \mid e^{-\beta \mathfrak{H}_N} \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} \right\} \\ &= \frac{1}{2} Z_N \times \langle \theta_a, \theta_b \mid \rho_{II} \mid \varphi_a, \varphi_b \rangle \end{aligned} \tag{3.135}$$

where $\mathfrak{H}_N$ is the N particle hamiltonian; the factor 1/2 arises from the fact that ρ_{II} is normalized with a trace equal to $N(N-1)$, and not to $N(N-1)/2$. We therefore have the simple relation:

$$\langle \theta_a, \theta_b \mid \rho_{II} \mid \varphi_a, \varphi_b \rangle = 2 \left. \frac{d}{dx} \right|_{x=0} \mathrm{Log}\, Z \tag{3.136}$$

If we apply this formula to an exact expression of Log $\mathcal{Z}_{gc}$, containing all terms of the expansion in Ursell operators, we will get exactly the same result as when using (3.33); but, if we start from some approximate expressions of Log $\mathcal{Z}_{gc}$, different results are in general obtained by the two methods. As an illustration, we apply (3.136) to the lowest order treatment of the interactions given by (3.48); because U_1 does not depend on the interaction potential the only variation of Log $\mathcal{Z}_{gc}$ arises from that of U_2, which is given by:

$$dU_2^{S,A} = dx \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{n-1} \left\{ \frac{1}{n!} [-\beta \mathfrak{H}_2(1,2)]^p \mid 1:\varphi_a; 2:\varphi_b\rangle \, |1:\theta_a; 2:\theta_b\rangle \times \right.$$
$$\left. \times [-\beta \mathfrak{H}_2(1,2)]^{n-p-1} \left[\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2} \right] \right\} \quad (3.137)$$

where the two particle hamiltonian $\mathfrak{H}_2$ is equal to:

$$\mathfrak{H}_2(1,2) = \frac{[\mathbf{P}_1]^2 + [\mathbf{P}_2]^2}{2m} + V(1,2) \quad (3.138)$$

Introducing the summation index $p' = n - p - 1$, we can write:

$$dU_2^{S,A} = dx \sum_{p,p'=0}^{\infty} \left\{ \frac{1}{[p+p'+1]!} [-\beta \mathfrak{H}_2]^p \mid 1:\varphi_a; 2:\varphi_b\rangle\langle 1:\theta_a; 2:\theta_b \mid \times \right.$$
$$\left. \times [-\beta \mathfrak{H}_2]^{p'} \left[\frac{1+\eta P_{ex}}{2} \right] \right\} \quad (3.139)$$

which, after insertion into (3.48) and (3.135), gives:

$$\rho_{II} = \sum_{p,p'=0}^{\infty} \frac{1}{[p+p'+1]!} [-\beta \mathfrak{H}_2(1,2)]^p [1+\eta f(1)] [1+\eta f(2)] [-\beta \mathfrak{H}_2(1,2)]^{p'} [1+\eta P_{\text{ex}}] \quad (3.140)$$

This result is indeed different from (3.66) - (3.68); now the brackets $[1+f]$ appear in the center of the product of operators, instead of at both ends, and there are two of them instead of four; moreover, series which cannot be summed in exponentials or operators f remain explicitly in the final result. If we insert $V(1,2) = 0$ into this expression, we readily recover the expression of the two body operator given in (3.44).

We now study the properties of (3.140) at short relative distances and show that the two particle distribution indeed vanishes in regions of the configuration space where the repulsion is sufficiently strong. Assume that we keep p' fixed and sum over p. If $p' = 0$, the sum over p of $[-\beta \mathfrak{H}_2]^p$ introduces the operator:

$$\frac{e^{-\beta \mathfrak{H}_2} - 1}{[-\beta \mathfrak{H}_2]} \quad (3.141)$$

In the same way, if $p' = 1$, the same summation introduces:

$$\frac{e^{-\beta\mathfrak{H}_2} - [1 - \beta\mathfrak{H}_2]}{[-\beta\mathfrak{H}_2]^2} \tag{3.142}$$

and so on for $p' = 2, 3, ..$: for each value of p' we obtain a function which contains in the numerator an exponential and a polynomial in $\mathfrak{H}_2$ with a degree which is inferior to that of the numerator. Therefore, if $\mathfrak{H}_2$ becomes infinite, all these expressions vanish. Now, assume that we calculate the matrix element:

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r} \mid \rho_{II} \mid \Psi \rangle = \sum_{p'} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r} \mid \sum_{p} \frac{1}{[p + p' + 1]!} [-\beta\mathfrak{H}_2]^p \mid \Theta_{p'} \rangle \tag{3.143}$$

where:

$$\mid \Theta_{p'} \rangle = [1 + \eta f(1)]\,[1 + \eta f(2)]\,[-\beta\mathfrak{H}_2]^{p'} \mid \Psi \rangle \tag{3.144}$$

and where $\mid \Psi >$ is any (fixed) ket. If we insert a closure relation over the eigenstates $\mid \varphi_q >$ of $\mathfrak{H}_2$, with energies E_q, we get:

$$\sum_q \left\{ \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r} \mid \varphi_q \rangle \langle \varphi_q \mid \Theta_0 \rangle \left[\frac{e^{-\beta E_q} - 1}{-\beta E_q} \right] + \right.$$
$$+ \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r} \mid \varphi_q \rangle \langle \varphi_q \mid \Theta_1 \rangle \left[\frac{e^{-\beta E_q} - [1 - \beta E_q]}{[-\beta E_q]^2} \right]$$
$$\left. + \left[\text{term } p' = 2 \right] + \text{etc.} \right\} \tag{3.145}$$

All terms $p' = 0, 1, 2, ..$ in the right hand of this equation contain different fractions which vanish when the energy becomes infinite. Assume now that the interaction potential is strongly repulsive at short relative distances. Then, if $\mathbf{r}$ is sufficiently small, the scalar product $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r} \mid \varphi_q \rangle$ will be non zero only if the energy E_q is sufficiently large; in the limit of hard core repulsion, it actually completely vanishes if $|\mathbf{r}| \leq b$, where b is the range of the interaction. This shows that all terms in the right hand side of (3.145) becomes zero at short relative distances[14], and therefore that ρ_{II} has the cancellation properties discussed in section 3.4. Obviously the same reasoning applies to the conjugate matrix element $\langle \Psi \mid \rho_{II} \mid \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r} \rangle$, provided that the summation over p' is now made before the summation over p[15]. Equation (3.140) therefore contains the desired non perturbative cancellation properties of ρ_{II} at short relative distances. We note that, with this method, the derivative with respect to the

[14] We assume here that all $\mid \Theta_{p'} \rangle$ remain finite (see next footnote).

[15] Difficulties would nevertheless arise for diagonal matrix elements $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r} \mid \rho_{II} \mid \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r} \rangle$ with $|\mathbf{r}| \leq b$: the kets $\mid \Theta_{p'} \rangle$ would become infinite under the effect of the factor $[-\beta\mathfrak{H}_{12}]^{p'}$ in (3.144). As in the method used in section 3.4, a more detailed study including higher order terms is needed when the particles become close in both the bra and the ket; we do not study this particular case here.

potential is first order instead of second order; there is a closer relation between the value of $\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$ and ρ_{II}, so that the result obtained for the latter could be less sensitive to approximations made in $\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}$. On the other hand, the big advantage of the method used in the text is that it provides compact analytic expressions where all summations have been incorporated into exponentials or fractions of operators.

3.6 Le cas de formation de paires

Dans section 2.6 nous avons obtenu une expression du grand potentiel (multiplié par $-\beta$) adaptée à l'étude de la formation de paires. Cette correction Ξ^{paires} à la contribution du gaz parfait tient compte de la classe de diagrammes d'échelle et celle de boucles d'échange, faisant intervenir un nombre infini d'opérateurs U_2 et U_1 :

$$\Xi_{\mathrm{paires}} = -\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\mathrm{Log}\left[1 - z^2\widehat{U}_2^{S,A}(1,2)\right]\right\} \tag{3.146}$$

avec :

$$\widehat{U}_2^{S,A}(1,2) = U_2^{S,A}(1,2) \times [1 + \eta f(1)] \times [1 + \eta f(2)] \tag{3.147}$$

Pour déterminer l'opérateur densité reduit nous revenons à la forme dans laquelle le logarithme est developpé en serie (2.99), et où la variation des opérateurs U_1 est à mettre en œuvre :

$$\sum_{m_2'=1}^{\infty} \frac{1}{m_2'} \mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\left[\overline{U}_2^{S,A}(1,2) f(1) f(2)\right]^{m_2'}\right\} \tag{3.148}$$

Chaque opérateur f est à son tour exprimé en somme sur des opérateurs U_1. De manière analogue qu'en section 3.3.3, les variations des opérateurs U_1 peuvent avoir lieu,

i) dans les U_1 issus du même f,

ii) dans deux f consécutifs ou,

iii) dans des opérateurs f separés par un ou plus d'opérateurs U_2, les f agissant sur la même particule ou deux différentes.

Dans tous les cas, on peut, par permutation circulaire, toujours arriver à une expression dans laquelle le U_1 de la première variation (en $\mathrm{d}x$) est en première position au sein de la trace. Comme dans le cas du gaz parfait, cette opération supprime exactement le facteur $1/m_2'$.

Dans le premier cas, nous utilisons la substitution (3.73). Après l'opération de permutation circulaire le premier terme mentionné ci-dessus mène à :

$$\sum_{m_2'=0}^{\infty} \mathrm{Trace}_{1,2}\left\{\overline{U}_2^{S,A}(1,2)\eta f(1)\,|1:\varphi_x\rangle\,\langle 1:\theta_x|\,f(1)\,|1:\varphi_y\rangle\right.$$
$$\left.\langle 1:\theta_y|\,[1+\eta f(1)]\,f(2) \times \left[\overline{U}_2^{S,A}(1,2) f(1) f(2)\right]^{m_2'}\right\} \tag{3.149}$$

ce qui donne lieu à la forme opératorielle suivante :

$$\eta P_{\rm ex} f(1) \otimes [1+\eta f(2)]\,{\rm Trace}_3 \left\{ \frac{z^2 \widehat{U}_2^{S,A}(2,3)}{1 - z^2 \widehat{U}_2^{S,A}(2,3)} \right\} \tag{3.150}$$

Le deuxième terme de la substitution aboutit à un résultat équivalent, les rôles des particules 1 et 2 étant échangés; nous remarquons que cette partie de l'opérateur densité ne contient pas de correction hamiltonienne entre les deux particules. D'ailleurs, on peut s'attendre à ce résultat puisque le terme de source était injecté dans un opérateur f agissant uniquement sur une particule. Le terme (3.150) et le terme obtenu en y échangeant les particules 1 et 2 se regroupent avec le produit d'opérateurs à un corps du premier membre de (3.33) pour introduire une version correctement (a)symétrisée de ce produit de manière analogue à ce qui se passe dans l'approximation à un opérateur U_2 (deuxièmes lignes de (3.66) et de (3.68)) :

$$\rho_I \otimes \rho_I + (3.150) + (\text{symétrique}) \rightarrow [1+\eta P_{\rm ex}]\,\rho_I \otimes \rho_I\,[1+\eta P_{\rm ex}] \tag{3.151}$$

La deuxième possibilité, à savoir de varier les U_1 dans des opérateurs f consécutifs, donne lieu à deux substitutions simples (3.76), d'où sort la contribution suivante :

$$2\sum_{m_2'=0}^{\infty} {\rm Trace}_{1,2} \Big\{ \overline{U}_2^{S,A}(1,2) f(1)\,|1:\varphi_x\rangle\,\langle 1:\theta_x|\,[1+\eta f(1)]\,f(2) \times |2:\varphi_y\rangle\,\langle 2:\theta_y|\,[1+\eta f(1)]\,f(2) \left[\overline{U}_2^{S,A}(1,2) f(1) f(2)\right]^{m_2'} \Big\} \tag{3.152}$$

Cette fois il est possible de faire passer le premier $f(2)$ avant le projecteur $|1:\varphi_x\rangle \times \langle 1:\theta_x|$, et le $[1+\eta f(1)]$ derrière le projecteur sur la deuxième particule. Ainsi, la trace est reduite à un seul terme correspondant à l'élément de matrice entre $\langle \theta_x, \theta_y|$ et $|\varphi_x, \varphi_y\rangle$, de sorte que la contribution due à ce type de variation est :

$$2\,[1+\eta f(1)] \times [1+\eta f(2)]\,\frac{z^2 \widehat{U}_2^{S,A}(1,2)}{1 - z^2 \widehat{U}_2^{S,A}(1,2)} \tag{3.153}$$

Comme on s'y attendait, il apparait clairement que l'élément de matrice de cette partie de ρ_{II} diverge pour les états propres de $\widehat{U}_2^{S,A}(1,2)$ donnant lieu à la condensation BCS (dont les valeurs propres deviennent proches de z^{-2}).

Les termes obtenus en variant des opérateurs f non-consécutifs font intervenir une trace sur une particule auxiliaire comme elle apparaît dans (3.150). Comme (3.151), ils ne contiennent aucune corrélation dynamiques entre les deux particules sur lesquelles l'opérateur densité agit. Ainsi, nous arrivons au resultat suivant concernant la partie de ρ_{II} conprennant les corrélations à courte distance :

$$\boxed{\rho_{II}^{(\text{paires})}\Big|_{\substack{\text{courte}\\ \text{distance}}} = 2\,[1+\eta f(1)] \times [1+\eta f(2)]\,\frac{z^2 \widehat{U}_2^{S,A}(1,2)}{1 - z^2 \widehat{U}_2^{S,A}(1,2)}} \tag{3.154}$$

C'est un resultat simple et concis qui donne accès, de façon microscopique, à la structure des paires de Cooper.

4. Grandeurs thermodynamiques et longueur d'Ursell

Introduction au chapitre

DANS CE CHAPITRE nous discutons les propriétés des éléments de matrice de l'opérateur U_2, l'ingrédient de base de notre développement, et approfondissons notre étude sur la formule de Beth-Uhlenbeck généralisée obtenue dans le chapitre 2. Cette formule apparaît dans notre développement comme le premier terme (à un facteur $-\beta$ près) du grand potentiel $\Omega = F - \mu N$ venant après la contribution du gaz parfait. Nous en déduisons les expressions des corrections aux grandeurs thermodynamiques valables pour un gaz dilué-généré, et mettons en évidence les contributions des différentes ondes partielles de collision. A la fin de ce chapitre se trouve un traitement détaillé et un calcul numérique de cet opérateur dans le cas d'un potentiel de sphères dures.

Dans un premier temps, nous allons étudier les éléments de matrice de l'opérateur d'Ursell à deux particules U_2. Nous calculons l'élément de matrice de cet opérateur (en représentation d'interaction) au premier ordre de perturbation en V_{int}, en utilisant l'approximation du pseudopotentiel (dans sa version la plus simple, celle qui est habituellement employée – voir section 1.2.2). Afin de comparer les résultats exacts pour U_2 avec les prédiction de la théorie du pseudopotentiel, nous définissons la *longueur d'Ursell* $a_U(k)$, qui dépend de l'impulsion relative des deux particules sur lesquelles agit U_2, alors qu'elle serait constante et égale à la longueur de diffusion a si les deux méthodes étaient équivalentes. La définition de cette longueur est :

$$a_U(k) = -\frac{\mathcal{V}}{2\lambda_T^2} \left\langle \mathbf{k} \mid \overline{U}_2 \mid \mathbf{k} \right\rangle \tag{4.1}$$

($\mathcal{V}$ correspond au volume du système, λ_T à la longueur d'onde thermique) ou, dans sa version symétrisée :

$$a_U^{S,A}(k) = -\frac{\mathcal{V}}{\lambda_T^2} \left\langle \mathbf{k} \mid \overline{U}_2^{S,A} \mid \mathbf{k} \right\rangle \tag{4.2}$$

(Les définitions sont choisies de façon qu'elles deviennent identiques à haute température (particules de Boltzmann, $\eta = 0$)). Nous déterminons plus bas la longueur a_U pour un potentiel de sphères dures et nous verrons qu'elle peut effectivement être très différente de a. Il ressort de cette étude que, pour des bosons, les deux méthodes aboutissent au même résultat dans le domaine de validité de la théorie des pseudopotentiels, $a/\lambda_T \ll 1$. Par contre, pour de fermions, la situation se présente différemment. Comme à basse température les impulsions des particules ne tendent pas vers zéro, à cause de l'existence de la sphère de Fermi, le traitement des collisions ne se

limite pas aux moments relatifs proches de zéro. C'est pourquoi la théorie des pseudopotentiels simple, qui ne tient compte que de la longueur de diffusion, n'arrive pas à fournir une représentation aussi complète des effets physiques.

Nous observons en fait un changement de signe de $a_U(k)$, changement qui intervient pour des impulsion relatives de plus en plus petites lorsque la température est de plus en plus faible. Un signe négatif tend à indiquer une attraction entre les particules. Nous interprétons ce résultat en terme d'une interaction effective, que les particules d'impulsions relatives les plus élevées ressentent lors d'une collision : quand nous projetons les fonctions d'onde planes de ces états sur les états couplés, l'intégrale de recouvrement ne s'annule pas complètement, même pour des états couplés de basse énergie. Comme, cependant, le poids de ces états dans l'intégrale est exponentiellement plus fort à cause du facteur de Boltzmann, ces collisions dans un état couplé de faible impulsion jouent un rôle important. Les particules sont alors ralenties pendant la collision, de sorte que le résultat net est comparable à un effet d'attraction. Ce comportement peut être interprété comme un précurseur de la condensation de paires de fermions.

Nous continuons notre étude avec la généralisation de la formule de Beth-Uhlenbeck (2.12) obtenue au chapitre 2. Afin de rendre le résultat plus explicite, nous remplaçons la trace de l'expression (2.12) par une intégrale sur les états d'impulsion d'onde planes plus une somme sur les états liés et utilisons la longueur d'Ursell, ce qui permet de comparer directement nos resultats avec ceux de la théorie de pseudopotentiels. Dans le cas de particules sans spin, nous obtenons pour la partie des états du continuum :

$$[\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]_{\mathrm{int}}^{\mathrm{cont}} = -\frac{\lambda_T^2 \mathcal{V}}{(2\pi)^6} \int \mathrm{d}^3k_1 \int \mathrm{d}^3k_2\, f(\mathbf{k}_1)\, f(\mathbf{k}_2)\, a_U^{S,A}(k) \tag{4.18}$$

Dans cette formule les opérateurs f (2.72) sont remplacés par leurs éléments de matrice diagonaux dans une base de vecteurs propres, des fonctions d'ondes planes $\{|\mathbf{k}\rangle\}$:

$$f(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} \mid f \mid \mathbf{k} \rangle \tag{4.3}$$

En remplaçant $a_U^{S,A}(\mathbf{k})$ par la longueur de diffusion a multipliée par l'(anti)symétriseur S_2/A_2, nous retrouverons par (4.18) la valeur de l'énergie potentielle (multipliée par $-\beta$) calculée par la méthode du pseudopotentiel[48: (appendices A.2,3)].

La partie du grand potentiel due aux états liés fait intervenir la base discrète $\{|\Phi_n\rangle\}$, avec valeurs propres E_n de l'hamiltonien relatif, et la base du continuum :

$$[\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]_{\mathrm{int}}^{\mathrm{bound}} = (2\pi)^{-6} \mathcal{V}^2 \int \mathrm{d}^3K \int \mathrm{d}^3q\, f(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{q})\, f(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{q}) \times \\ \times \sum_n |\langle \mathbf{q} \mid \Phi_n \rangle|^2\, \mathrm{e}^{\beta\left(E_n + \hbar^2 q^2/m\right)} \tag{4.31}$$

On remarque que le mélange des états liés avec ceux du continuum ayant une faible impulsion est plus important, car la valeur de l'intégrale de recouvrement $|\langle \mathbf{q} \mid \Phi_n \rangle|^2$ est plus élevée pour des fonctions d'onde planes peu oscillant. Les effets de mélange

peuvent jouer un rôle important dans le cas des atomes alcalins dont le potentiel d'interaction dégage un nombre d'états liés; en particulier, cette contribution d'états liés peut être d'importance dans le cas du Lithium, où elle pourrait être en concurrence avec les effets dûs à la longueur de diffusion negative.

En dérivant le grand potentiel par rapport aux paramètres appropriés, nous obtenons des quantités thermodynamiques exprimées en termes de la longueur d'Ursell. Pour des particules de spin $1/2$, sans états liés, nous trouvons la correction suivante à la valeur du gaz parfait pour la densité de particules n :

$$
\begin{aligned}
[n]_{\text{int}}^{\text{cont}} &= \left[\frac{\langle n\rangle}{\mathcal{V}}\right]_{\text{int}}^{\text{cont}} = \mathcal{V}^{-1} z \frac{\partial}{\partial z}\left[\text{Log}\, \mathcal{Z}_{\text{gc}}\right]_{\text{int}}^{\text{cont}} \\
&= -\frac{\lambda_T^2}{(2\pi)^6}\int \mathrm{d}^3k_1 \int \mathrm{d}^3k_2 \left\{2a_U^{S,A}(|\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2|)\, f_+(k_1) f_+(k_2)\left[1+\eta f_+(k_1)\right]\right. \\
&\qquad \left. + id.\,(f_+ \Leftrightarrow f_-) + 2a_U(|\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2|) f_+(k_1) f_-(k_2)\left[2+\eta f_+(k_1)+\eta f_-(k_2)\right]\right\}
\end{aligned}
\tag{4.52}
$$

Dans cet expression nous appelons $f_+(k)$ l'élément matrice diagonal de l'opérateur f pour une particule de spin $+1/2$ et d'impulsion $\mathbf{k}$. De la même manière, nous calculons l'aimantation $M/\mathcal{V}$ (4.53), la densité d'énergie interne w (4.54) et la susceptibilité magnétique χ (4.59). On remarque que dans toutes ces expressions des facteurs comme $f_+(k_1)\left[1+\eta f_+(k_1)\right]$ apparaissent dans l'intégrant. Dans le cas de fermions à basse température, ces facteurs limitent l'ensemble d'états qui contribuent au résultat à ceux d'une énergie proche du potentiel chimique (proche de la surface de Fermi). Comme la longueur d'Ursell est proportionelle à a (en premier ordre en longueur de diffusion a), on peut démontrer que, dans la limite de basse température, $[n]_{\text{int}}^{\text{cont}}$ devient proportionnel à nk_Fa (k_F : impulsion de Fermi $\sim n^{1/3}$) de sorte que nous peuvent identifier le paramètre de notre développement comme étant $an^{1/3}$, parfois appelé *paramètre de dilution* (*gas parameter*). Notre approximation est alors valable si $an^{1/3}$ est petit devant un, autrement dit, s'il s'agit d'un gaz dilué, comme c'est bien le but de la technique des opérateurs d'Ursell.

L'article [74] que nous soumettrons à la publication traite ses thèmes en détail et se trouve inclus dans ce qui suit.

Ursell Operators in Statistical Physics III: thermodynamic properties of degenerate gases

4.1 Introduction

The use of quantum cluster expansions was introduced in 1938 by Kahn and Uhlenbeck [43], who generalized to quantum statistical mechanics the Ursell functions U_q defined by this author in 1927 [39]. The major virtue of cluster expansions is that they provide directly density expansions for systems where the interaction potential is not a necessarily small perturbation; in fact, it may even diverge at short relative distances (hard cores for instance) while usual perturbations theories generate power series in

the interaction potential, where each term becomes infinite for hard core potentials. Starting from a quantum cluster analysis, the Beth Uhlenbeck formula [42, 55, 75] gives an explicit expression of the first terms of a fugacity expansion (or virial expansion) for the grand potential of a quantum gas. The expression is valid for any potential, the latter being characterized by its phase shifts in a completely general way.

One should nevertheless keep in mind that the words "density expansion" have a double meaning in this context. In a dilute gas, there are actually two dimensionless parameters which characterize "diluteness": the product $n^{1/3}b$, where n is the number density of the gas and b is a length characterizing the potential range (diameter of hard cores for instance), and the product $n^{1/3}\lambda_T$, where λ_T is the quantum thermal wavelength of the particles. The former parameter is small if, classically, a snapshot of the system shows particles among which almost all are moving freely, while the few that interact are engaged in binary collisions only; the latter, purely quantum in nature, is small provided there is no overlap of the quantum wave packets (the gas is not degenerate). The validity of the Beth Uhlenbeck formula, as all fugacity expansions, therefore requires two independent parameters to be small.

In a previous article [49], we have shown that it is actually possible to treat separately the two parameters, namely to include the effects of statistics exactly while limiting the expansion to the lowest orders in $n^{1/3}b$. The technique is based on the use of Ursell operators U_q generalizing the Ursell functions (for a system of distinguishable particles), coupled with the exact calculation of the effect of exchange cycles C_l of arbitrary length l; for short we call it the technique of U-C diagrams. The result is another expression of the grand potential, which is no longer a fugacity expansion since it includes a summation over all sizes of exchange cycles so that statistical effects are included to all orders. Truncating the expansion to its first terms (lowest q values and/or low order in a given U_q) gives results which remain valid for "dilute degenerate systems" [54], that is for all systems where the potential range is sufficiently small, but where the degeneracy of the system may become significant[1]. In this article we will start from an expression of the grand potential which is limited to the first order correction in the second Ursell operator U_2, obtained in [49] as a trace over two particles of a product of operators. We reduce the trace to an explicit integral where the effects of the interactions are contained in a simple matrix element. The range of validity of our result is actually similar to that of the calculations based on the use of pseudopotentials [76], another non perturbative approach (in terms of the potential). The two methods are comparable, but we think that the U-C diagram method provides more general and more precise results, basically because it includes the short range correlations between the particles, and because all scattering channels with given angular momentum as well as their exact energy dependence are included instead of only one constant scattering length[2].

[1] For bosons, Bose Einstein condensation is excluded since it requires a summation over an infinite number of interaction terms, a question which we will study in a forthcoming article

[2] This does not mean that one could not improve the theory of pseudopotentials to include all phase shifts, since a general expression of the pseudopotential is given by Huang in [30], but to our knowledge this has not been done explicitly.

We begin this article with a study of the expression of the grand potential, and show how it can be expressed as an expression that is similar to the well known Beth Uhlenbeck formula; actually it can be obtained from it by two simple substitutions. We then discuss the physics contained in this general result, as well as the changes introduced by the possible occurrence of bound states. In particular we consider the effects of exchange between bound and unbound particles, an effect which is not contained in the usual Beth Uhlenbeck formalism; this kind of exchange may play some role in clouds of laser cooled alkali atoms [15–17] for which the potential is sufficiently attractive to sustain a large number of bound states. In section 4.3 we apply these results to spin 1/2 particles. Finally, in section 4.4, we discuss the appropriate quantities in terms of which one should describe the effects of the potential on the physical properties of the system, and introduce for this purpose the so called "Ursell length", which plays a role similar to the scattering length a. In condensed matter and many body theories, it is usual to replace the real interaction potential between the particles by a "pseudopotential" that has no range (a Dirac delta function of the space variables), and to treat this potential to first perturbation order; in other words one ignores the distortion of the many-body wave functions at short relative distances and the associated effects of the particles correlations. The justification of this approach is based on the physical expectation that, for a dilute gas, all the effects of the potential should be contained in the binary collision phase shifts associated with the potential, which can easily be reproduced to first order by a pseudopotential; meanwhile all detailed information on the behavior of the wave function at short relative distances can safely be discarded. Our formalism, which gives the contribution of the interaction in terms of a matrix element which depends on the potential but does not reduce to it, allows a more precise discussion of this ansatz; in particular, for fermions at low temperatures, we come to the conclusion that unexpected effects may take place.

4.2 The grand potential

4.2.1 Notation

The basic object in terms of which most physical quantities will be written in this article is the second Ursell operator U_2, defined by:

$$U_2(1,2) = \left[\mathrm{e}^{-\beta\mathfrak{H}_2(1,2)} - \mathrm{e}^{-\beta[\mathfrak{H}_1(1)+\mathfrak{H}_1(2)]}\right] \tag{4.4}$$

where $\mathfrak{H}_1(1)$ and $\mathfrak{H}_1(2)$ are one particle hamiltonians, containing the kinetic energy of the particle and, if necessary, its coupling to an external potential, and where:

$$\mathfrak{H}_2(1,2) = \mathfrak{H}_1(1) + \mathfrak{H}_1(2) + V_{\mathrm{int}}(1,2) \tag{4.5}$$

is the hamiltonan of two particles, including the mutual interaction potential $V_{\mathrm{int}}(1,2)$. Depending of the context, it may be more convenient to use the symmetrized operator $U_2^{S,A}$:

$$U_2^{S,A}(1,2) = U_2(1,2)\frac{[1+\eta P_{\mathrm{ex}}]}{2} = \frac{[1+\eta P_{\mathrm{ex}}]}{2}U_2(1,2) \tag{4.6}$$

where P_{ex} is the exchange operator between particles 1 and 2 and η has the value +1 for bosons, −1 for fermions. Moreover, the "interaction representation version" of either U_2 and $U_2^{S,A}$, obtained by multiplying these operators by $e^{\beta\mathcal{H}_1(1)}e^{\beta\mathcal{H}_1(2)}$, will also be useful; we denote them with an additional bar over the operator, for instance:

$$\overline{U}_2(1,2) = \mathrm{e}^{\beta\mathcal{H}_1(1)}\mathrm{e}^{\beta\mathcal{H}_1(2)}\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_2(1,2)} - 1 \tag{4.7}$$

This operator, as well as its symmetrized version $\overline{U}_2^{S,A}(1,2)$, act only in the space of relative motion of the two particles; they have no action at all on the variables of the center of mass.

Finally, if the particles are not submitted to an external potential ($\mathcal{H}_1$ contains only the kinetic energy), it is convenient to introduce the momentum $\mathbf{P}_G$ of the center of mass of the two particles as well as the hamiltonian of the relative motion:

$$\mathcal{H}_{\text{rel}} = \frac{\mathbf{P}^2}{m} + V_{\text{int}}(\mathbf{R}) \tag{4.8}$$

(m is the mass of the particles); then, $U_2(1,2)$ can be written in the form of a product:

$$U_2(1,2) = \mathrm{e}^{-\beta(\mathbf{P}_G)^2/4m} \times [U_2(1,2)]_{\text{rel}} \tag{4.9}$$

with:

$$[U_2(1,2)]_{\text{rel}} = \left[\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_{\text{rel}}} - \mathrm{e}^{-\beta\frac{\mathbf{P}^2}{m}}\right] \tag{4.10}$$

4.2.2 Approximate expression of the thermodynamic potential

We now start from relation (46) of [49] which gives the grand potential (multiplied by $-\beta$) in the form:

$$\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}} = [\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}}]_{\text{ig}} + [\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}}]_{\text{int}} \tag{4.11}$$

where $[\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}}]_{\text{ig}}$ is the well known value of $\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ for the ideal gas:

$$\begin{aligned}[\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}}]_{\text{ig}} &= -\eta\text{Trace}\left\{\text{Log}\left[1 - \eta z\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_1}\right]\right\} \\ &= \eta\text{Trace}\left\{\text{Log}\left[1 + \eta f\right]\right\}\end{aligned} \tag{4.12}$$

and where the correction introduced by the interactions is:

$$[\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}}]_{int} = z^2\,\text{Trace}_{1,2}\left\{U_2^{S,A}(1,2)\,[1+\eta f(1)]\,[1+\eta f(2)]\right\} \tag{4.13}$$

In these equations,

$$z = \mathrm{e}^{\beta\mu} \tag{4.14}$$

is the fugacity, $\beta = 1/k_B T$ the inverse temperature and μ the chemical potential, while f is defined as the operator:

$$f = \frac{z e^{-\beta \mathfrak{H}_1}}{1 - \eta z e^{-\beta \mathfrak{H}_1}} \tag{4.15}$$

Similar results can be found in the work of Lee and Yang, see formulas (II.8) and (II.23) of ref. [45]. As mentioned in the introduction, equation (4.13) gives the correction introduced by the interactions to the lowest order approximation in U_2; see [49] for a discussion of the higher order corrections. Using the definition of $\overline{U}_2^{S,A}(1,2)$:

$$\overline{U}_2^{S,A}(1,2) = e^{\beta \mathfrak{H}_1(1)} e^{\beta \mathfrak{H}_1(2)} U_2^{S,A}(1,2) = \frac{1 + \eta P_{ex}}{2} \left[e^{\beta \mathfrak{H}_1(1)} e^{\beta \mathfrak{H}_1(2)} e^{-\beta \mathfrak{H}_2(1,2)} - 1 \right] \tag{4.16}$$

as well as the relation $z e^{-\beta \mathfrak{H}_1} [1 + \eta f] = f$, we can rewrite (4.13) in the form:

$$[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{gc}]_{int} = \mathrm{Trace}_{1,2} \left\{ \overline{U}_2^{S,A}(1,2)\, f(1) f(2) \right\} \tag{4.17}$$

which expresses the correction as the average of the operator $\overline{U}_2^{S,A}(1,2)$ over unperturbed distributions functions f's.

4.2.3 Spinless particles and rotational invariance

For spinless particles, by making the trace in (4.17) explicit, we obtain:

$$[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{gc}]_{int} = \mathcal{V} \int d^3 k_1 \int d^3 k_2\, f(\mathbf{k}_1)\, f(\mathbf{k}_2)\, \overline{u}^{S,A}(k) \tag{4.18}$$

where $\mathcal{V}$ is the volume of the system and where $\overline{u}^{S,A}(k)$ is defined by:

$$\begin{aligned} \overline{u}^{S,A}(k = |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|) &= (2\pi)^{-6}\, \mathcal{V} \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \mid \overline{U}_2^{S,A}(1,2) \mid \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle \\ &= (2\pi)^{-6}\, \mathcal{V} < \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 \mid \overline{U}_2^{S,A}(1,2) \mid \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 > \end{aligned} \tag{4.19}$$

(in the second line, $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ is the $\mathbf{k}$ vector of the relative motion of the two particles; this is valid because $\overline{U}_2^{S,A}(1,2)$ does not have any action in the space of variables associated to the center of mass of the two particles); $\overline{u}^{S,A}(k)$ is a microscopic volume, independent of $\mathcal{V}$ for large systems[3]. The correction written in (4.18) is analogous to a first order energy correction due to binary interactions, while $\overline{u}^{S,A}(k)$ plays the role of some effective interaction. We discuss the properties of $\overline{u}^{S,A}(k)$ in more detail below.

[3]This is true since $\overline{U}_2^{S,A}(1,2)$ has a microscopic range and since the factor $\mathcal{V}$ in (4.19) makes up for the normalization factor of the plane waves that occur in the matrix element (note that all kets in our formulas are normalized in a finite volume; hence the absence of Dirac delta functions of momenta differences in (4.19).

At this point, it is convenient to introduce the free spherical waves $| j^{(0)}_{k,l,m} >$ associated with the relative motion of the particles, with wave functions[4]:

$$< \mathbf{r} \mid j^{(0)}_{k,l,m} >= j_l(kr) Y_l^m(\hat{r}) \tag{4.20}$$

(with standard notation; j_l is a spherical Bessel function, $Y_l^m(\hat{r})$ a spherical harmonics of the angular variables of $\mathbf{r}$); if $| \mathbf{k} >$ is a plane wave normalized in a volume $\mathcal{V}$:

$$| \mathbf{k} >= \frac{4\pi}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{l,m} (i)^l \left[Y_l^m(\hat{k}) \right]^* \mid j^{(0)}_{k,l,m} > \tag{4.21}$$

If we insert this equality into (4.19) and take into account the well-known relation:

$$\sum_m \left| Y_l^m(\hat{k}) \right|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \tag{4.22}$$

we readily obtain the result[5]:

$$\overline{u}^{S,A}(k) = \sum_l (2l+1) \left[1 + \eta(-1)^l \right] \times \overline{u}_l^{(2)}(k) \tag{4.23}$$

with:

$$\overline{u}_l^{(2)}(k) = (2\pi)^{-5} \mathrm{e}^{\beta\hbar^2 k^2/m} < j^{(0)}_{k,l,m} \mid [U_2(1,2)]_{\mathrm{rel}} \mid j^{(0)}_{k,l,m} > \tag{4.24}$$

where $[U_2(1,2)]_{\mathrm{rel}}$ has been defined in (4.10); rotational invariance ensures that the right hand side of (4.24) is independent of m. These results can be inserted into the integral appearing in (4.18) and provide an expression of the correction to the grand potential which is more general than usual Beth Uhlenbeck formula.

For comparison, we recall the explicit expression of this formula:

$$[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]^{\mathrm{B.U.}}_{\mathrm{int}} = \frac{2^{3/2}}{\pi} z^2 \frac{\mathcal{V}}{(\lambda_T)^3} \sum_l (2l+1) \int \mathrm{d}k\, \mathrm{e}^{-\beta\hbar^2 k^2/m} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} \delta_l(k) \tag{4.25}$$

(we temporarily ignore possible bound states), where λ_T is the thermal wavelength:

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \tag{4.26}$$

As already discussed in [49], if we replace the two f's in (4.18) by their low density limit $e^{\beta(\mu - \hbar^2 k^2/2m)}$, the integration over $\mathrm{d}^3 K$ of a Gaussian function introduces a factor $8^{3/2} [\pi/\lambda_T]^3$ and, after some algebra, we recover (4.25). In other words, in (4.18), the

[4] To normalize these functions (with a Dirac function of k vectors and Kronecker delta's of l and m), it would be necessary to multiply all the $j^{(0)}_{k,l,m}(\mathbf{r})$'s by factors $k\sqrt{2/\pi}$; this operation is not necessary here.

[5] We assume rotational invariance, so that the matrix elements of $\overline{U}_2(1,2)$ are diagonal in l and m.

following substitutions are necessary to go from the usual Beth Uhlenbeck formula to its generalization[6] to higher degrees of degeneracy:

$$\begin{cases} e^{-\beta\hbar[(\mathbf{k}_1)^2+(\mathbf{k}_1)^2]/2m} \Leftrightarrow z^{-2} f(\mathbf{k}_1) f(\mathbf{k}_2) \\ (\lambda_T)^2 \dfrac{d}{dk}\delta_l(k) \Leftrightarrow \overline{u}_l^{(2)}(k) \end{cases} \tag{4.27}$$

In equation (4.13), the first of these substitution amounts to adding/suppressing the terms in ηf.

4.2.4 Spins

An easy generalization is to include spins; the only difference is that all the traces must now also include spin states. It is then convenient to replace the functions $f(\mathbf{k})$ of momentum by spin operators $f_S(\mathbf{k})$ (corresponding to two by two matrices for spin 1/2 particles) which are functions of $\mathbf{k}$ and are defined as:

$$\langle m_S \mid f_S(\mathbf{k}) \mid m_S' \rangle = \langle m_S, \mathbf{k} \mid \frac{z e^{-\beta \mathfrak{H}_1}}{1 - \eta z e^{-\beta \mathfrak{H}_1}} \mid m_S', \mathbf{k} \rangle \tag{4.28}$$

where $\mathfrak{H}_1$ is the one particle hamiltonian, including kinetic energy as well as coupling of the spins to the magnetic field (if the particles carry magnetic momentum). Similarly, because now the exchange of particles must also include their spin states, $\overline{u}^{S,A}(k)$ becomes an operator $\Sigma_S(k)$ which acts in the space of the states of two spins:

$$\Sigma_S(k) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, \overline{u}_l^{(2)}(k) \left[1 + \eta(-1)^l P_{\text{ex}}^S\right] \tag{4.29}$$

where P_{ex}^S is the exchange operators of two spins. This leads to the following generalization of (4.18):

$$[\text{Log}\, \mathcal{Z}_{\text{gc}}]_{\text{int}} = \mathcal{V} \int d^3k_1 \int d^3k_2\, \text{Trace}_{S_1,S_2} \{ f_S(\mathbf{k}_1) f_S(\mathbf{k}_2)\ \Sigma_S(k) \} \tag{4.30}$$

4.2.5 Bound states

It is not difficult either to include bound states in the result. In (4.17) we have to take into account their contributions to the trace, which amounts to adding the following term:

$$[\text{Log}\, \mathcal{Z}_{\text{gc}}]_{\text{int}}^{\text{bound}} = (2\pi)^{-6} \mathcal{V}^2 \int d^3K \int d^3q\ f(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{q})\, f(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{q}) \times \\ \times \sum_n \mid \langle \mathbf{q} \mid \Phi_n \rangle \mid^2 e^{\beta\left(E_n + \hbar^2 q^2/m\right)} \tag{4.31}$$

where the $\mid \Phi_n \rangle$'s are the kets associated with the eigenstate of the relative motion of the particles with (negative) energy $-E_n$; because these kets have a finite range,

[6] The two functions $\lambda_T^2\, d\delta_l(k)/dk$ and $\overline{u}_l^2(k)$ are not necessarily equal but, when multiplied by a Gaussian function $e^{-\beta\hbar^2\mathbf{k}^2/m}$, have the same integral over d^3k.

and because the plane waves $| \mathbf{q} >$ are normalized in a macroscopic volume $\mathcal{V}$, the product $\mathcal{V} \mid \langle \mathbf{q} \mid \Phi_n \rangle \mid^2$ is independent of $\mathcal{V}$ in the thermodynamic limit, as necessary to obtain an extensive correction to the grand potential. If we rewrite the integral of (4.31) in the form:

$$\int \mathrm{d}^3K \int \mathrm{d}^3q\, e^{-\beta\hbar^2\mathbf{K}^2/4m} \left[1 + \eta f(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{q})\right] \times \left[1 + \eta f(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{q})\right] \sum_n \mid \langle \mathbf{q} \mid \Phi_n \rangle \mid^2 \mathrm{e}^{\beta E_n} \quad (4.32)$$

we may distinguish between two contributions in the correction:

$$[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]^{\mathrm{bound}}_{\mathrm{int}} = [\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]^{\mathrm{bound}}_{\mathrm{B.U.}} + [\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]^{\mathrm{bound}}_{\mathrm{stat.}} \quad (4.33)$$

The first contribution is obtained by ignoring in (4.32) the ηf's inside the brackets, which allows to integrate over d^3K; using the closure relations over the plane waves $| \mathbf{q} \rangle$ and the normalization of the bound states $| \Phi_n \rangle$ then provides the following result for this first contribution of the bound states:

$$[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]^{\mathrm{bound}}_{\mathrm{B.U.}} = 2^{3/2}\, [\lambda_T]^{-3}\, \mathcal{V} \sum_n \mathrm{e}^{\beta E_n} \quad (4.34)$$

which is identical to the term corresponding to bound states in the usual Beth Uhlenbeck formula. The second contribution arises from the rest of the product of the brackets and is equal to:

$$[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]^{\mathrm{bound}}_{\mathrm{stat.}} = (2\pi)^{-6} \mathcal{V}^2 \int \mathrm{d}^3K \int \mathrm{d}^3q\, \mathrm{e}^{-\beta\hbar^2\mathbf{K}^2/4m} \left[f(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{q}) f(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{q}) + \right. \\ \left. + \eta f(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{q}) + \eta f(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{q}) \right] \sum_n \mid \langle \mathbf{q} \mid \Phi_n \rangle \mid^2 \mathrm{e}^{\beta E_n} \quad (4.35)$$

It accounts for exchange effects between bound states and continuum states[7], which explains the appearance of the scalar product $\langle \mathbf{q} \mid \Phi_n \rangle$ of a free plane wave and a bound state wave function; the factors $e^{\beta E_n}$ correspond physically to the Boltzmann distribution of the populations of the bound states.

If we assume that the momenta in the continuum, which have values that are limited by the presence of the f's under the integral, are much smaller than those contained in the bound states $| \Phi_n \rangle$'s, we can replace the product $\langle \mathbf{q} \mid \Phi_n \rangle$ by $\langle \mathbf{q} = \mathbf{0} \mid \Phi_n \rangle$; this shows that the effect of statistics is more important for bound states with a wave function with a significant integral over space, as for instance the ground state wave function which has no node; states with rapidly oscillating wave functions give almost no correction to the usual Beth Uhlenbeck formula. Generally speaking, for bosons, the effect of statistics is always to increase the Beth Uhlenbeck term (4.34). For fermions, the situation is more complicated: if the gas is only slightly degenerate one has $f^2 < f$ so that the terms in η dominate in (4.35), leading to a decrease of the effects of bound states; but if the gas is strongly degenerate, there seems to be no general rule, and exchange of bound states with the continuum may either enhance or reduce their contribution.

[7] The exchange effects between bound states themselves will be investigated in another article with the study of pair condensation (BCS condensation for fermions); they are higher order in U_2.

4.3 Spin 1/2 particles

We now apply the preceding calculations to the study of the magnetic susceptibility of a dilute gas of fermions or bosons with spin 1/2 (spin polarized atomic hydrogen provides an example of spin 1/2 bosons [77, 78]). We assume that the one particle hamiltonian is:

$$\mathfrak{H}_1 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z \tag{4.36}$$

where $\omega_0/2\pi$ is the Larmor frequency in the (homogeneous) magnetic field and σ_z the Pauli matrix (operator) associated with the component of the spin along the field; we set:

$$z_\pm = \mathrm{e}^{\beta(\mu \pm \hbar\omega_0/2)} = z\mathrm{e}^{\pm\beta\hbar\omega_0/2} \tag{4.37}$$

which gives the following values for the matrix elements[8] of $f_S(\mathbf{k})$ defined in (4.28):

$$f_\pm(\mathbf{k}) = \frac{z_\pm \mathrm{e}^{-\beta\hbar^2k^2/2m}}{1 - \eta z_\pm \mathrm{e}^{-\beta\hbar^2k^2/2m}} \tag{4.38}$$

For short we will write:

$$f_\pm(1) = f_\pm(\mathbf{k}_1) \qquad\qquad f_\pm(2) = f_\pm(\mathbf{k}_2) \tag{4.39}$$

With this notation we have:

$$\begin{aligned}
[\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]_{\mathrm{ig}} &= -\eta\frac{\mathcal{V}}{8\pi^3}\int \mathrm{d}^3k_1\,\mathrm{Log}\left\{\left[1 - \eta z_+\mathrm{e}^{-\beta\hbar^2k_1^2/2m}\right]\left[1 - \eta z_-\mathrm{e}^{-\beta\hbar^2k_1^2/2m}\right]\right\} \\
&= \eta\frac{\mathcal{V}}{8\pi^3}\int \mathrm{d}^3k_1\,\mathrm{Log}\left\{[1 + \eta f_+(1)]\,[1 + \eta f_-(1)]\right\}
\end{aligned} \tag{4.40}$$

For a gas at equilibrium the operators $f_S(\mathbf{k})$ are diagonal in the basis corresponding to a quantization axis parallel to the magnetic field; we then have:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Trace}_{S_1,S_2}\left\{f_S(\mathbf{k}_1)f_S(\mathbf{k}_2)\right\} &= \mathrm{Trace}_{S_1}\left\{f_S(\mathbf{k}_1)\right\} \times \mathrm{Trace}_{S_2}\left\{f_S(\mathbf{k}_2)\right\} \\
&= [f_+(1) + f_-(1)]\,[f_+(2) + f_-(2)]
\end{aligned} \tag{4.41}$$

as well as:

$$\mathrm{Trace}_{S_1,S_2}\left\{f_S(\mathbf{k}_1)f_S(\mathbf{k}_2)P_{\mathrm{ex}}^S\right\} = f_+(1)f_+(2) + f_-(1)f_-(2) \tag{4.42}$$

(the latter result arises because the trace gets non zero contributions only from the two spin states $|+,+\rangle$ and $|-,-\rangle$, which are invariant under the effect of P_{ex}^S). We therefore have:

$$\begin{aligned}
[\mathrm{Log}\,\mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}]_{\mathrm{int}} = \mathcal{V}\int d^3k_1 \int d^3k_2 \Big\{ &\overline{u}^{S,A}(k)\;[f_+(1)f_+(2) + f_-(1)f_-(2)] \\
&+2\overline{u}_{\mathrm{d}}(k)\;f_+(1)f_-\,(2)\Big\}
\end{aligned} \tag{4.43}$$

[8] We remind the reader that, except for an ideal gas, the $f_\pm$'s are not the populations of the one body dentity operators, but differ from them by density corrections [68].

where:

$$k = \mid \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 \mid \tag{4.44}$$

while $\overline{u}^{S,A}(k)$ and $\overline{u}_{\mathrm{d}}(k)$ are defined by (4.19) and:

$$\overline{u}_{\mathrm{d}}(k) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\overline{u}_l^{(2)}(k) \tag{4.45}$$

$\overline{u}_{\mathrm{d}}(k)$ is analogous to $\overline{u}^{S,A}(k)$, defined in (4.23), but without any exchange term, hence the index d for "distinguishable particles".

4.3.1 Density of particles and of energy; magnetization.

The number density of the gas is obtained from the relation:

$$n = \frac{\langle N \rangle}{\mathcal{V}} = \mathcal{V}^{-1}\, z\frac{\partial}{\partial z}[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}] \tag{4.46}$$

Similarly, then density of internal energy is given by:

$$w = \frac{\langle U \rangle}{\mathcal{V}} = -\mathcal{V}^{-1}\frac{\partial}{\partial \beta}[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}] \tag{4.47}$$

while the "magnetization"[9] is equal to:

$$M = \frac{2}{\beta\hbar}\frac{\partial}{\partial \omega_0}[\mathrm{Log}\, \mathcal{Z}_{\mathrm{gc}}] \tag{4.48}$$

We therefore have to vary either z, or β, or ω_0 in formulas (4.40) and (4.43); we can then use the simple relations:

$$\mathrm{d}z_{\pm} = z_{\pm}\left(\frac{\mathrm{d}z}{z} \pm \frac{\hbar\omega_0}{2}\mathrm{d}\beta \pm \beta\hbar\frac{\mathrm{d}\omega_0}{2}\right) \tag{4.49}$$

and:

$$z_{\pm}\frac{\partial f_{\pm}}{\partial z_{\pm}} = f_{\pm}\left[1 + \eta f_{\pm}\right] \tag{4.50}$$

as well as:

$$\frac{\partial f}{\partial \beta} = f_{\pm}\left[1 + \eta f_{\pm}\right]\left[-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \frac{\hbar\omega_0}{2}\right] \tag{4.51}$$

[9] What we call here magnetization is not a real magnetic moment (ampere square meter) but a dimensionless number equal to the sum of the average values of σ_z of all atoms; in other words, the maximum value of M (complete spin polarization, all spins parallel) is equal to the total number of particles.

We then obtain, by making use of the symmetry in the indices 1 and 2:

$$n = (2\pi)^{-3} \int \mathrm{d}^3 k_1 \, [f_+(1) + f_-(1)] + \\ + \int \mathrm{d}^3 k_1 \int \mathrm{d}^3 k_2 \left\{ 2\overline{u}^{S,A}(k) \, f_+(1) f_+(2) \, [1 + \eta f_+(1)] + id. \, (f_+ \Leftrightarrow f_-) + \right. \\ \left. + \, 2\overline{u}_d(k) f_+(1) f_-(2) \, [2 + \eta f_+(1) + \eta f_-(2)] \right\} \quad (4.52)$$

where $id.\,(f_+ \Leftrightarrow f_-)$ symbolizes the same expression with the replacement of f_+ by f_-. The calculation of M is almost the same, except that now, because of (4.49), f_+ and f_- introduce different signs; the result is:

$$\frac{M}{\mathscr{V}} = (2\pi)^{-3} \int \mathrm{d}^3 k_1 \, [f_+(1) - f_-(1)] + \\ + \int \mathrm{d}^3 k_1 \int \mathrm{d}^3 k_2 \left\{ 2\overline{u}^{S,A}(k) f_+(1) f_+(2) \, [1 + \eta f_+(1)] - id. \, (f_+ \Leftrightarrow f_-) + \right. \\ \left. + \, 2\eta \overline{u}_d(k) f_+(1) f_-(2) \, [f_+(1) - f_-(2)] \right\} \quad (4.53)$$

Finally, the calculation of the internal energy w provides the result:

$$w = w_E + w_M \quad (4.54)$$

where w_E is the density of energy associated with the external variables of the particles (kinetic and potential energy):

$$w_E = (2\pi)^{-3} \int \mathrm{d}^3 k_1 \, [f_+(1) + f_-(1)] \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \\ + \int \mathrm{d}^3 k_1 \int \mathrm{d}^3 k_2 \left\{ 2\overline{u}^{S,A}(k) f_+(1) f_+(2) \, [1 + \eta f_+(1)] \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + id. \, (f_+ \Leftrightarrow f_-) + \right. \\ \left. + \, 2\overline{u}_d(k) f_+(1) f_-(2) \left[[1 + \eta f_+(1)] \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + [1 + \eta f_-(2)] \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \right] \right\} \quad (4.55)$$

while w_M is the density of magnetic energy:

$$w_M = -\frac{\hbar \omega_0}{2} \frac{M}{\mathscr{V}} \quad (4.56)$$

We now assume that the magnetic field is sufficiently low so that the preceding expressions may be limited to their first order expansion in $\omega_0 \simeq 0$. We then use the relations:

$$f_\pm \simeq f + \frac{\partial f_\pm}{\partial z_\pm} \frac{\partial z_\pm}{\partial \omega_0} \mathrm{d}\omega_0 = f \pm z \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\beta \hbar \mathrm{d}\omega_0}{2} = f \left[1 \pm \beta \hbar \frac{\mathrm{d}\omega_0}{2} [1 + \eta f] \right] \quad (4.57)$$

which provide:

$$n(d\omega_0) \simeq n(0) = (4\pi^3)^{-1} \int \mathrm{d}^3 k_1 f(1) \\ + \int \mathrm{d}^3 k_1 \int \mathrm{d}^3 k_2 f(1) f(2) \left\{ 4\overline{u}^{S,A}(k) \, [1 + \eta f(1)] + 4\overline{u}_d(k) \, [1 + \eta f(1)] \right\} \quad (4.58)$$

and for the zero field magnetic susceptibility of the gas:

$$\chi = \frac{M}{\mathrm{d}\omega_0 \mathcal{V}} = \beta\hbar \int \mathrm{d}^3k_1 f(1)\,[1+\eta f(1)] + \beta\hbar \int \mathrm{d}^3k_1 \int \mathrm{d}^3k_2 f(1)f(2) \times$$
$$\times \left\{ 2\,\overline{u}^{S,A}(k)\,[1+\eta f(1)]\,[2+2\eta f(1)+\eta f(2)] + \right.$$
$$\left. + \overline{u}_d(k)\,[[f(1)-f(2)]^2 + 2\eta f(1)\,[1+\eta f(1)]] \right\} \quad (4.59)$$

4.3.2 Physical discussion

Equations (4.52) and (4.53) show how quantum statistical effects modify the equation of state and the magnetic susceptibility of a gas. What determines the properties of the dilute system is not directly the matrix elements of the potential V_{int}, but those of the operator $\overline{U}_2$. Of course, if the potential is weak, the calculation may be limited to first order perturbation theory, so that $\overline{U}_2$ may be replaced by $-\beta V_{int}$; the two operators then become equivalent. But, in more realistic situations, for instance in atomic systems where the interaction potential at short relative distances becomes very large, the effects of the potential can not be treated to first order. An obvious difference between $\overline{U}_2$ and V_{int} is that the former depends on one more characteristic length than the potential, the thermal wavelength λ_T, so that one can expect that its range will depend explicitly on the temperature. This may affect physical results; for instance, it is often argued that a description of the interactions in terms of the scattering length is sufficient at very low temperatures, because the range of the potential V_{int} remains always much smaller than the de Broglie wavelengths of the particles. However, the argument becomes more questionable in terms of the matrix element of $\overline{U}_2$ since, precisely at very low temperatures, $\overline{U}_2$ may acquire a range that exceeds by far that of the potential itself. We will see examples of this phenomenon in section 4.4.

We now discuss the limit of validity of the results obtained in the preceding section or, since they are equivalent, of equations (4.17) and (4.30). If the particles are bosons, our theory is limited to gases which are not too close to Bose Einstein condensation - while of course the degeneracy may be much more pronounced than for the Beth Uhlenbeck formula since z does not have to be small. The reason is that, when a system of bosons approaches the region of quantum condensation, the distribution function f starts to build up a singularity at low energies. Indeed, for a condensed system, f contains a delta function of momentum so that a formula such as (4.52) is no longer defined mathematically: it would involve a square of delta functions which diverges; the same is true for the other results. Of course, if the first order correction may become larger than the zero order term, our approximation to the partition function is no longer valid. But one can also see directly that, when $z \to 1$, the partition function becomes more and more sensitive to terms of higher and higher order in $\overline{U}_2$, in $\overline{U}_3$, $\overline{U}_4$, etc. , since they contain larger and larger number of functions f (or of factors $1+\eta f$). In other words, terms which normally remain small corrections become dominant when the Bose Einstein condensation is approached; see the discussion already given in [54], where it is emphasized[10] that a theory limited to first order in $\overline{U}_2$

[10]Unfortunately, in [54] an assumption of this discussion is not made explicit, namely the fact that the

would predict the disappearance of the Bose Einstein condensation phenomenon and its replacement by a simple crossover between two regimes.

For fermions, the discussion is different since no special phenomenon takes place when z reaches one; when the gas is cooled at constant density, this merely corresponds to a cross over region where the gas is becoming degenerate. From this point, when the temperature is decreased even more, a stronger degeneracy builds up while $z = e^{\beta\mu}$ becomes larger and larger (β increases while μ remains almost constant if the density is fixed). It is therefore clear that z itself can not be an expansion parameter in this region; but, fortunately, our perturbation series may converge for degenerate systems if the matrix elements of $\overline{U}_2$ are sufficiently small. In the next section, we will see that these matrix elements are equal to the product $\lambda_T^2 a$, where λ_T is the thermal wave length and a is some microscopic length that we will define more precisely later. Let us for instance discuss (4.52) where the interaction corrections involve a double integral over two momenta. If we replace the two $\overline{u}_2$'s by a constant $\lambda_T^2 a$, the integration over one of the momenta introduces the number density n; the integration over the other momentum involves a function $f(1-f)$, which in the limit of low temperatures is non zero only in an energy slice of width β^{-1} at the surface of the Fermi sphere; the corresponding width Δk in terms of momentum is given by:

$$\frac{\hbar^2 k_F \Delta k}{m} = \beta^{-1} \tag{4.60}$$

(where $\hbar k_F$ is the momentum at the Fermi surface) so that the result of these integrations is:

$$n\left(\lambda_T^2 a\right) \times 4\pi k_F^2 \frac{1}{2\pi k_F \lambda_T^2} = 2nk_F a \tag{4.61}$$

The small parameter of the expansion is therefore the product $k_F a$, which is not very different from $n^{1/3}a$ for degenerate gases, and indeed remains small if the distance between the particles is much larger than a. We note in passing that the phase occupation factor $(1-f)$ plays an essential role in this argument[11]: if we had ignored it, we would have found $na\lambda_T^2$ as the expansion parameter as in the derivation of the Beth Uhlenbeck formula. So our conclusion seems to be that our generalized Beth Uhlenbeck is valid for arbitrary degeneracy; in the next section, we will see that this is not the case because the factor a itself may become very large at very low temperatures, and we will relate this phenomenon to BCS pair condensation. For the moment we conclude that, for bosons and fermions, our calculations remain valid as long as statistical condensation is not too close.

4.4 Matrix elements of $\overline{U}_2$

We now study in more detail the values of the basic ingredient that we use to describe the effects of the interactions on the thermodynamic properties of a quantum

matrix elements of U_2 should be positive (dominant character of the attractive interactions in the matrix element).

[11] In (4.53), the factor $[f_+(1) - f_-(2)]$ may be written as $[f_+(1) - 1 + 1 - f_-(2)]$, which shows that it also contains phase space occupations factors.

gas, namely the diagonal matrix element $\overline{u}^{S,A}(k)$ of $\overline{U}_2^{S,A}$ – together with $\overline{u}_d(k)$ if the particles have spins, see section 4.3. A natural question then is the following: to determine these coefficients, is it sufficient to characterize the potential in terms of its binary collision phase shifts, which determine the asymptotic behavior of interacting wave functions, or is it also necessary to include some information on the behavior of the wave functions at short relative distances, inside the potential? At very low temperatures, is it possible, even more simply, to reason in terms of the scattering length only?

In the literature on low temperature dilute systems, it is often considered as physically obvious that the short range properties of the potential play no role in the thermodynamics so that it is possible to replace the real potential by an effective potential (or pseudopotential) which has the following expression:

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\mathbf{r}) \tag{4.62}$$

where a is the scattering length; actually the usual procedure is to treat this potential to first order only[12], since the naive treatment of higher orders may introduce inconsistencies[13]. On the other hand, statistical effects arising from particle exchange are expected to be more important when the particles are close, and the absence of any short range influence of the potential is not necessarily completely obvious. We discuss here this question in the context of the generalized Beth Uhlenbeck formula that we have obtained, with the help of simple examples such as a step like potential mimicking a real interaction potential, or even hard spheres. We show how another length than the scattering length a, the Ursell length $a_U(k)$, is more appropriate to describe the effects of the interaction potential. We now define this new quantity length, which depends in general of the temperature (while a does not).

4.4.1 Ursell length

If the interaction potential V_{int} were sufficiently weak, we could use a first order perturbation expression of the Ursell operator:

$$U_2 = -\int_0^\beta d\beta' \mathrm{e}^{-\beta' H_0} V_{int} e^{(\beta'-\beta)H_o} + \ldots \tag{4.63}$$

which would lead to the following expression:

$$< \mathbf{k} \mid \overline{U}_2 \mid \mathbf{k} >= -\beta < \mathbf{k} \mid V_{int} \mid \mathbf{k} > + \ldots \tag{4.64}$$

[12]Another popular approach, which does not require the introduction of the pseudopotential (4.62) but is almost equivalent, is to use perturbation theory in terms of the interaction potental V_{int}, and in a second step to replace in all expressions the matrix elements of V_{int} by those of the T matrix of collision theory; in this way finite corrections are obtained even for hard cores potentials.

[13]For instance, in three dimensions, it is possible to show that all phase shifts, and therefore the collision cross section, of a zero range potential such as (4.62), are exactly zero; on the other hand, they do not vanish to first order (in other words, the Born series for potentials containing a delta function is not convergent). For the same reason, for a potential such as (4.62), the Ursell operator U_2 vanishes exactly, while it does not if the potential is treated to first order.

For a more elaborate discussion of pseudopotentials going beyond (4.62) and including waves of higher angular momentum, see [30].

Inserting (4.62) into this result provides:

$$< \mathbf{k} \mid \overline{U}_2 \mid \mathbf{k} >= -\beta \frac{4\pi\hbar^2 a}{m\mathcal{V}} = -\frac{2a\lambda_T^2}{\mathcal{V}} \tag{4.65}$$

where $\mathcal{V}$ is the macroscopic volume and λ_T the thermal wavelength (4.26).

By analogy with this first order calculation, it is convenient to characterize the diagonal matrix elements in terms of a length, $a_U(k)$, which we will call the Ursell length and define by:

$$a_U(k) = -\frac{\mathcal{V}}{2\lambda_T^2} < \mathbf{k} \mid \overline{U}_2 \mid \mathbf{k} >= -\frac{\mathcal{V}}{2\lambda_T^2} e^{\beta\hbar^2 k^2/m} < \mathbf{k} \mid [U_2]_{rel} \mid \mathbf{k} > \tag{4.66}$$

This very definition ensures that, within the theory of the pseudopotential, $a_U(k)$ is exactly equal to the scattering length a. This length therefore provides a convenient tool for a discussion of the validity of this approximation: as long as $a_U(k)$ remains very close to a for all relevant values of $\mathbf{k}$, the theory of pseudopotentials and ours provide equivalent results. For identical particles, what is needed is the symmetrized Ursell length:

$$a_U^{S,A}(k) = -\frac{\mathcal{V}}{\lambda_T^2} < \mathbf{k} \mid \overline{U}_2^{S,A} \mid \mathbf{k} >= -\frac{(2\pi)^6}{\lambda_T^2} \overline{u}^{S,A}(k)$$

which allows to write the correction to the grand potential (4.17) in the form:

$$[\mathrm{Log}\, Z]_{int} = -\frac{\lambda_T^2 \mathcal{V}}{(2\pi)^6} \int d^3k_1 \int d^3k_2\, f(\mathbf{k}_1) f(\mathbf{k}_2)\, a_U^{S,A}(|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|) \tag{4.67}$$

In what follows we discuss the values of the Ursell length and its $\mathbf{k}$ dependence with the help of a few examples.

If, as in section 4.2.3, we denote $\mid j_{k,l,m}^{(0)} >$ the free spherical waves, we can expand $a_U(k)$ and $a_U^{S,A}(k)$ as sums over various l angular momentum channels:

$$\begin{aligned} a_U(k) &= \sum_l (2l+1) a_U^{(l)}(k) \\ a_U^{S,A}(k) &= \sum_l (2l+1) \left[1 + \eta(-1)^l\right] a_U^{(l)}(k) \end{aligned} \tag{4.68}$$

with:

$$a_U^{(l)}(k) = -\frac{2\pi}{\lambda_T^2} e^{\beta\hbar^2 k^2/m} < j_{klm}^{(0)} \mid [U_2]_{rel} \mid j_{klm}^{(0)} > \tag{4.69}$$

At this stage, it is convenient to use spherical waves that are normalized in a sphere of volume $\mathcal{V} = 4\pi R^3/3$. We therefore introduce a new notation, $\mid \varphi_{klm}^{(0)} >$, but these kets are simply proportional to the $\mid j_{klm}^{(0)} >$:

$$\mid \varphi_{klm}^{(0)} >= x_{kl} \mid j_{klm}^{(0)} > \tag{4.70}$$

where x_{kl} is a normalization coefficient which in the limit of large values of the product kR is equal to:

$$x_{kl} = \sqrt{\frac{2k^2}{R}} \tag{4.71}$$

Introducing in the same way the normalized kets $\mid \varphi_{k'lm} >$ in the presence of the interaction potential, we can write:

$$a_U^{(l)}(k) = -\frac{2\pi}{\lambda_T^2}\left[x_{kl}\right]^{-2}\left[\sum_{k'}\left|< \varphi^{(0)}_{k,l,m} \mid \varphi_{k',l,m} >\right|^2 e^{-\beta\left[e(k')-e(k)\right]} - 1\right] \tag{4.72}$$

where $e(k)$ and $e(k')$ are the energy of the free and interacting states.

4.4.2 Steplike potential

In order to simplify our discussion, we now consider an interaction potential made of a hard core of diameter xb (with $x \leq 1$) and of an attractive part ($V_{int} = -V_0$) from relative distance $r = xb$ to $r = b$; see figure 4.1. Our discussion is in fact more general, but this kind of simplified potential is a convenient way to mimic the effects of a more realistic interaction potential, containing strong repulsion at short distances and Van der Waals attraction at large distances. For instance, it is not difficult to find a relation between V_0, x and b which ensures that the scattering length of this potential vanishes (compensation of the effects of attraction and repulsion at low energies). Does this imply that the matrix elements of U_2, that is the Ursell length $a_U(k)$, also vanish? Not in general; this is because the scalar products $< \varphi^{(0)}_{k,l,m} \mid \varphi_{k',l,m} >$ in (4.72) are not only sensitive to the changes of the interacting wave functions outside of the potential (which do not occur if the scattering length vanishes) but also to their values inside the potential. In other words, for a degenerate dilute gas, all the effects of the potential are not contained in the scattering phase shifts, as opposed to what happens in the case of weak degeneracy which corresponds to the well known Beth Uhlenbeck formula (4.25).

We nevertheless note that, when the range b of the potential tends to zero, the corrections to the scalar products are necessarily of third order in b (at least), while first order terms occur in the phase shifts (for instance, at very low temperatures, the Beth Uhlenbeck formula predicts a correction which is proportional to $b\lambda_T^2$, instead of b^3). Therefore, if the potential range is sufficiently small (compared to the two other microscopic distances, the average distance between particles $n^{-1/3}$ and λ_T), one may limit the calculation to first order in b so that the contribution of the distortion of the wave functions inside the potential may be ignored. Then all effects of the potential on the thermodynamic properties are contained in the collision phase shifts.

We therefore conclude that, in all calculations which are limited to first order in the potential range, it is indeed correct to characterize the potential by its long distance effects on the wave function (phase shifts) only, while short range effects are irrelevant; for low energy collisions, all effects are then contained in the scattering length.

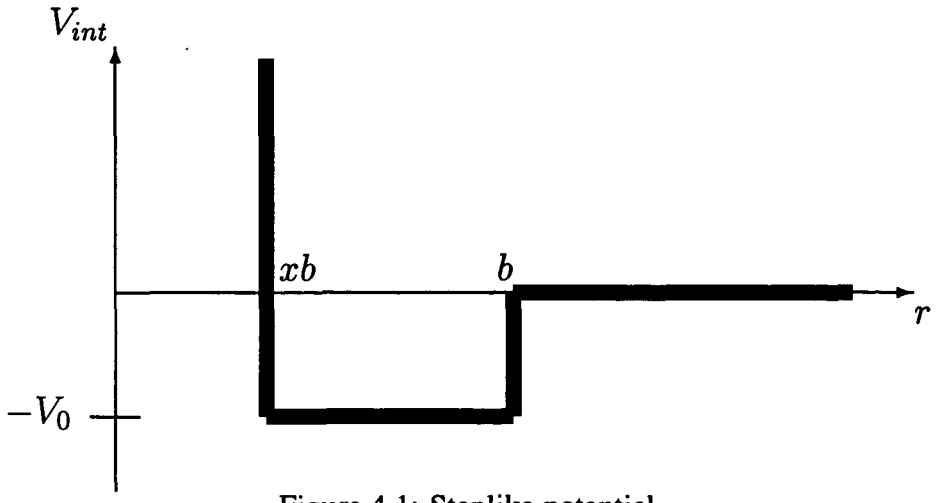


Figure 4.1: Steplike potential

Steplike potential used to discuss compensation effects between the attractive and the repulsive part on the scattering length; V_0 is the depth of the attractive potential, b its range; a hard core of range xb is assumed ($x < 1$). While a relation between these three parameters can be found to make the scattering length a vanish, the effect of the potential on the wave function inside its range remain significant.

On the other hand, this is not necessarily the case if higher order terms in the potential range are included.

4.4.3 Hard spheres

For hard spheres, the interacting wave function does not penetrate into the potential; this is a special case where, to all orders in the potential range b (which turns out to be equal to the scattering length a), all physical effects of the potential are necessarily contained in the collision phase shifts. But this is not sufficient to ensure that the theory of pseudopotentials should be equivalent to our results, and we now discuss this question.

Analytical calculation

s waves For free waves, the quantification for the wave numbers is given by:

$$k = \frac{n\pi}{R} \tag{4.73}$$

while, for hard spheres of diameter a, the interacting waves satisfy the relation:

$$k' = \frac{n'\pi}{R-a} \tag{4.74}$$

where n and n' are integer numbers. The scalar products of (4.72) then become functions of these numbers:

$$< \varphi^{(0)}_{k,0,0} \mid \varphi_{k',0,0} >= \frac{2}{\sqrt{R(R-a)}} \int_a^R dr \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) \sin\left(\frac{n'\pi\,(r-a)}{R-a}\right) \tag{4.75}$$

which, after a simple calculation, leads to:

$$\left| < \varphi^{(0)}_{k,0,0} \mid \varphi_{k',0,0} > \right|^2 = \pi^{-2} \sin^2 \frac{n\pi a}{R} \frac{4n'^2\left[1-\frac{a}{R}\right]}{\left[n'-n\,(1-a/R)\right]^2 \left[n'+n\,(1-a/R)\right]^2} \tag{4.76}$$

This result, when inserted into (4.72) for $l = 0$, provides the contributions of s waves to the Ursell length. Equivalent results for infinite volume (only s wave) are given by Lee and Yang [44]; we have checked that our numerical results are compatible with those of these authors. Since $na/R = ka/\pi$, equation (4.76) shows that the scalar product is peaked around a value of n' given by:

$$n' = n - E(\frac{ka}{\pi}) \tag{4.77}$$

where E is the integer value; for low energies, $ka \ll 1$ and the preceding equation reduces to $n' = n$.

Assume for instance that we are interested in calculating the Ursell length to first order in a, and in the s wave channel only. Equation (4.76) shows that only the term $n' = n$ contributes and that the corresponding value is:

$$\sin^2 \frac{n\pi a}{R} \frac{4n^2\left[1-\frac{a}{R}\right]}{\left[\frac{n\pi a}{R}\right]^2 n^2 \left[2-\frac{2a}{R}\right]} \simeq 1 \tag{4.78}$$

so that (4.72) becomes to this order:

$$a_U^{(0)}(k) = -\frac{2\pi}{\lambda_T^2} \frac{R}{2k^2} \left[-\beta \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{m} \left(\frac{1}{(R-a)^2} - \frac{1}{R^2}\right)\right] = a \tag{4.79}$$

The first order value is therefore merely equal to a; but we will see that $a_U^{(0)}(k)$ may strongly differ from this value if higher orders effects in the potential range are included.

larger l values Formula (4.75) can be generalized to non-zero angular momentum l. The sine functions of the free and the hard-sphere wave-functions have to be replaced by either a spherical Bessel function or a linear combination of this function and von-Neumann functions of order l respectively. After normalization we obtain for $|\mathbf{r}| > a$:

$$\varphi_{k',l,0}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2a^2k^4}{R\left[(ka)^2 m_l^2(ka) - a/R\right]}} \left[j_l(k'a) n_l(k'r) - n_l(k'a) j_l(k'r)\right] Y_l^0(\hat{r}) \tag{4.80}$$

$m_l(k'a)$ stands for "modulus"[79: 9.2.17]:

$$m_l(k'a) = \sqrt{j_l^2(k'a) + n_l^2(k'a)} \tag{4.81}$$

The quantification conditions have to be modified; (4.74) now becomes implicit:

$$k'R + \eta_l(k') = n\pi + \frac{l\pi}{2} \tag{4.82}$$

where $\eta_l(k')$ stands for the l-wave phase shift for wave number k', which is given by:

$$\eta_l(k') = \arctan \frac{j_l(k'a)}{n_l(k'a)} - m_{k'}\pi \tag{4.83}$$

In this definition we limit the values of the inverse tangent to the interval $\left[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}\right[$ and $m_{k'}$ counts the number of times that — by increasing $k'a$ from zero to the final value — the value of inverse tangent jumps from $\frac{\pi}{2}$ to $-\frac{\pi}{2}$. In this way we obtain η_l as a continuous function of k'. For large values of $k'a$, the effects of the centrifugal barrier become negligible and the quantification condition becomes independent of l so that it reduces to the s-wave expression (4.74).

The normalized free wave function is given by (4.20), so that we arrive at the following expression for the square of the scalar product:

$$\left|\left\langle \varphi^{(0)}_{k\,l0} | \varphi_{k'\,l0} \right\rangle\right|^2 = \left[\frac{2a(ka)(k'a)}{R[(k'a)^2 - (ka)^2]}\right]^2 \frac{1}{(k'a)^2 m_l^2(k'a) - a/R}\, j_l^2(ka) \tag{4.84}$$

Numerical results

Inserting (4.76) and (4.84) into (4.72) and then into (4.68) provides the Ursell length, which determines the diagonal matrix element of $\overline{U}_2$ (or $\overline{U}_2^{S,A}$ for identical particles). For brevity, we just give the results of our numerical calculations of $a_U(k)$; in other words we only discuss interactions between particles in different spin states. But there is no difficulty in treating the general case, since the calculation of $a_U^{S,A}(k)$ is very similar; moreover, as soon as the wave number k is sufficiently small, one simply has $a_U^S(k) \simeq 2a_U(k)$ and $a_U^A(k) \simeq 0$. The results concerning $a_U(k)$ are shown in figures 4.2 and 4.3 (more details about the calculations can be found in appendix 4.6). There are two parameters in the problem, a and λ_T ; as a dimensionless variable it is convenient to take, either the product $k\lambda_T$, or ka ; the ratio a/λ_T is then kept as a fixed parameter, which has small values either when the potential range is very small or when the temperature is low. Figure 4.2 shows that, when $a \ll \lambda_T$, and as soon as $k\lambda_T$ remains smaller than 1, the Ursell length is indeed equal to a (with a good accuracy), so that the theory of the pseudopotential is fully justified. For higher temperatures, we note that the low energy values of $a_U(k)$ become noticeably different from a. This is not surprising since, when T increases, we progressively reach a classical regime of small wave packets, which no longer have a much larger spatial extent than the potential, while this is necessary for the approximation of the pseudopotential to apply. We therefore concentrate on low values of the ratio a/λ_T.

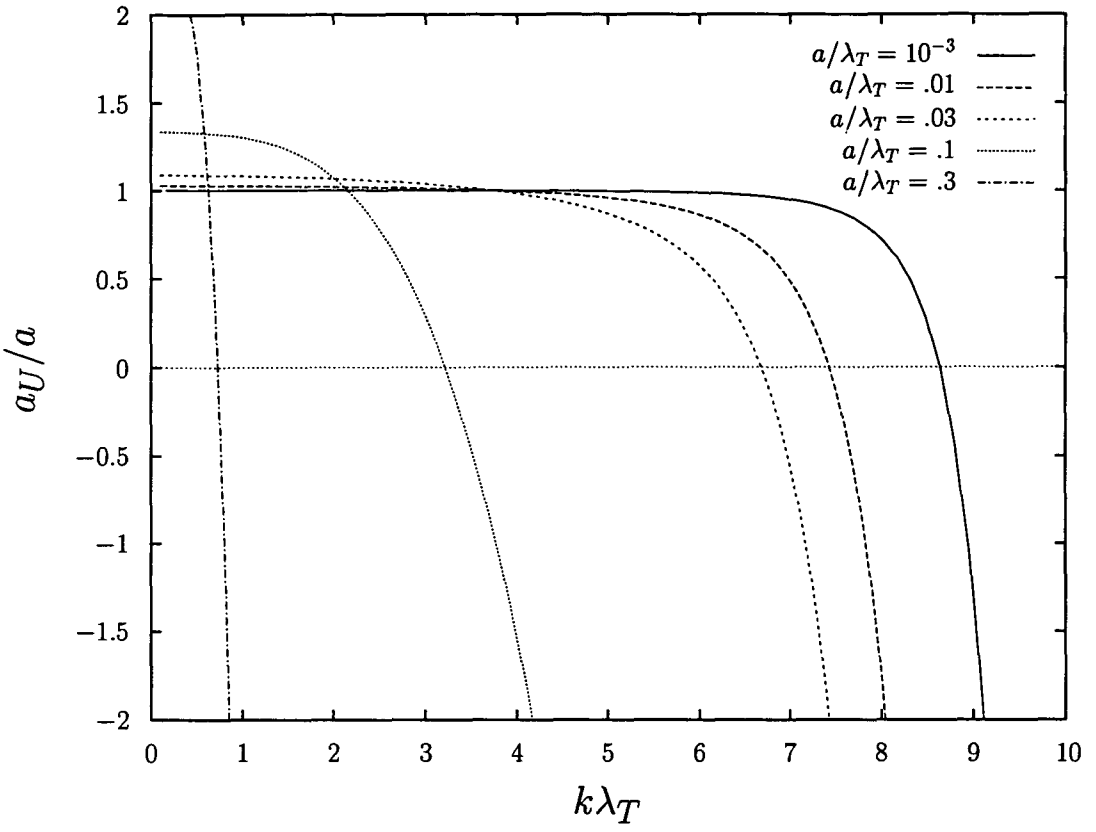


Figure 4.2: Ursell length in function of $k\lambda_T$

Variations of the ratio between the Ursell length $a_U(k)$ and the range a of the hard core potential as a function of the dimensionless variable $k\lambda_T$. The ratio a/λ_T, with values shown in the upper right, is a parameter which takes small values if either the temperature is sufficiently low or the radius of the hard cores sufficiently small.

If the system is made of bosons, since the distributions f's contained in (4.18) have at most the same width as Gaussian thermal exponentials, the values of $k\lambda_T$ that are relevant in the integral are comparable to 1, or smaller; figure 4.2 then shows that the use of our theory or of the theory of pseudopotentials lead to the same results. But assume now that the system is made of fermions[14], and that the temperature is progressively lowered at constant density. If the system is degenerate, the width of the functions f's is determined by the Fermi momentum k_F, which in turn depends on the density; in other words the width is practically independent of the temperature. Meanwhile, if the temperature is lowered more and more, λ_T increases so that the product $k\lambda_T$ can take arbitrarily large values inside the integral. On the other hand, ka remains limited to values smaller than 1 since, for degenerate gases where the distance between the particles is comparable to the inverse Fermi momentum in a degenerate gas, the

[14]For reasons mentioned above, we are dealing here with the description of interactions of fermions in opposite spin states.

diluteness condition $n^{1/3}a \ll 1$ yields:

$$1 \gg k_F a \geq ka \tag{4.85}$$

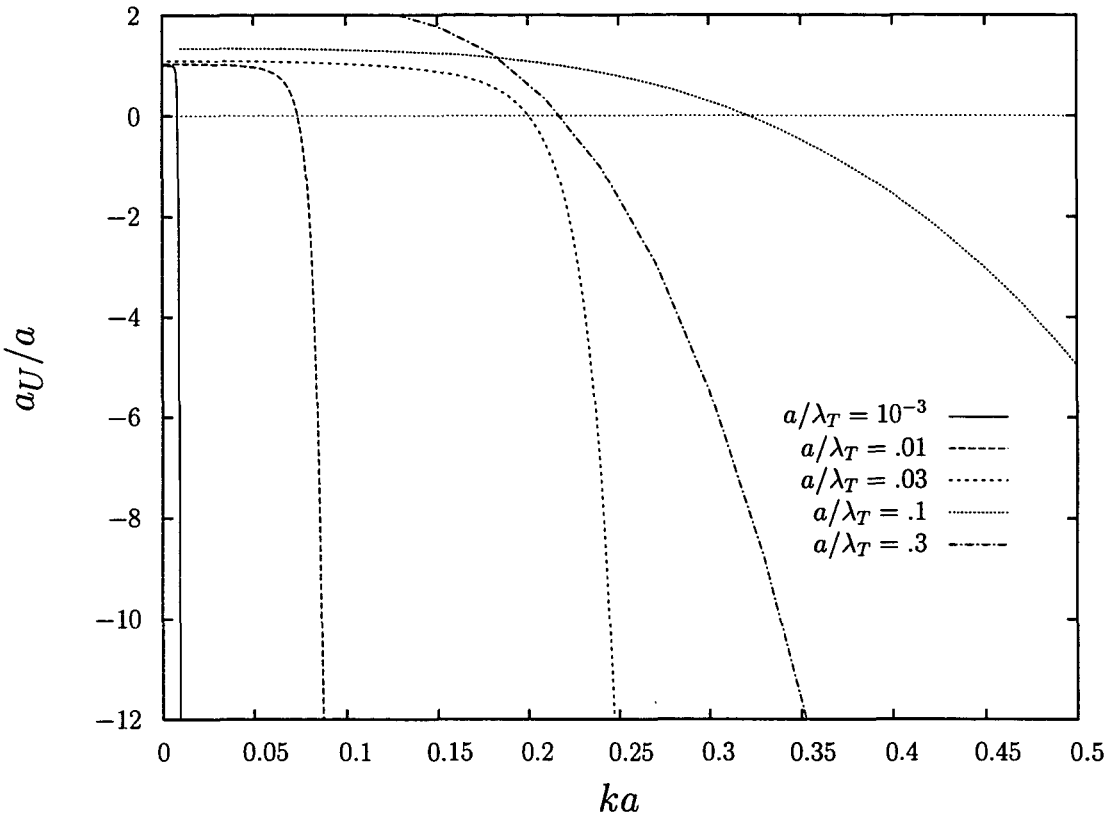


Figure 4.3: Ursell length in function of ka

Variations of the same quantity as in Figure 4.2, but as a function of the dimensionless variable ka; this representation is convenient for the discussion of fermions (where it characterizes interactions between particles in opposite spin states).

The departure from 1 of the curves of figure 4.2, which fall well below 1 when $k\lambda_T$ increases, shows that significant discrepancies from a pseudopotential theory may indeed be obtained. This is even more visible in figure 4.3, which uses a different variable, the product ka: even for small values of the ratio a/λ_T, significant departures of the Ursell length from a are obtained for small values of ka. Actually, the smaller a/λ_T, the more pronounced these departures are; we have an illustration of the consequences of the temperature dependence of $\overline{U}_2$, where the effects of the potential are more and more delocalized by thermal effects while λ_T increases; consequently, variations of the matrix element occur even if the range of the potential is very small and even if $ka \ll 1$. In figure 4.4, we plot the variations of the diagonal element $< \mathbf{r} \mid [U_2]_{rel} \mid \mathbf{r} >$ as a function of the relative position $\mathbf{r}$; the results show clearly how the second Ursell operator acquires a longer and longer range at decreasing temperatures.

A striking feature of figure 4.3 is the change of sign of the Ursell length which takes place when ka increases from zero. The origin of this change is understandable from (4.72), where one can easily convince oneself that the contribution of low values of k' becomes dominant as soon as k is sufficiently large; this is because, while the scalar product $\left| < \varphi^{(0)}_{k,l,m} \mid \varphi_{k',l,m} > \right|$ with $k' \simeq 0$ decreases relatively slowly when k increases (as k^{-2}), the exponential $e^{\beta e(k)-\beta e(k')}$ varies much more rapidly and so that it makes small values of k' dominate the sum. In other words, what determines the diagonal matrix element of U_2 is the contribution of interacting states that have a very small relative energy; because these states evolve more slowly in time than the free wave packets of energy $\hbar^2 k^2/m$, the net differential result is similar to an attraction. We therefore come to the conclusion that even hard cores can result in an effective attraction between fermions of opposite spins at the surface of a Fermi sphere, provided that the temperature is sufficiently low. But other interesting features also appear, which do not take place in a pseudopotential theory; for instance there is a strong dependence of the matrix element on the relative momentum and, for some value of k, the Ursell length (the effective interaction) vanishes; probably more important is the fact that the effective interaction increases almost exponentially as a function of k^2, which shows that the correction to the partition function is dominated by processes that take place preferably between particles having almost opposite momenta on the surface of the Fermi sphere (assuming that they have opposite spins). In terms of the discussion made at the end of section 4.3.2, this means that the value of a may become larger and larger at low temperatures, therefore limiting the range of validity of the first order U_2 theory to temperatures at which the relevant values of the Ursell length are not too large; at lower temperatures, the length becomes larger and larger, which seems to indicate a precursor of the BCS pairing phenomenon. We will discuss the subject in a future article.

4.5 Conclusion

Our formalism provides a more systematic treatment of the interactions in a dilute gas than a first order theory based on the use of a pseudopotential with zero range. In [68], we have shown how microscopic, short range correlations between particles could explicitly be taken into account and calculated. In the present article, we investigate the macroscopic properties of the gas by basing the discussion on expression (4.17), which resembles a first order perturbative expression of an energy correction, while it actually is different. This is mostly because the matrix element which appears in the expression is not the matrix element of the potential itself, or of some variety of pseudopotential, but the matrix element of the second Ursell operator U_2, which corresponds physically to a local Boltzmannian equilibrium. Except of course in trivial cases where the interaction potential is indeed weak for all values of the relative distances of the particles, which allows a first order treatment of the potential, this introduces significant differences; the major reason is the temperature dependence of the matrix element of U_2, which is in general more complex than being merely proportional to β. We have seen in particular that, for fermions at very low temperatures, effects of opposite signs may be predicted by our theory or a theory based on the

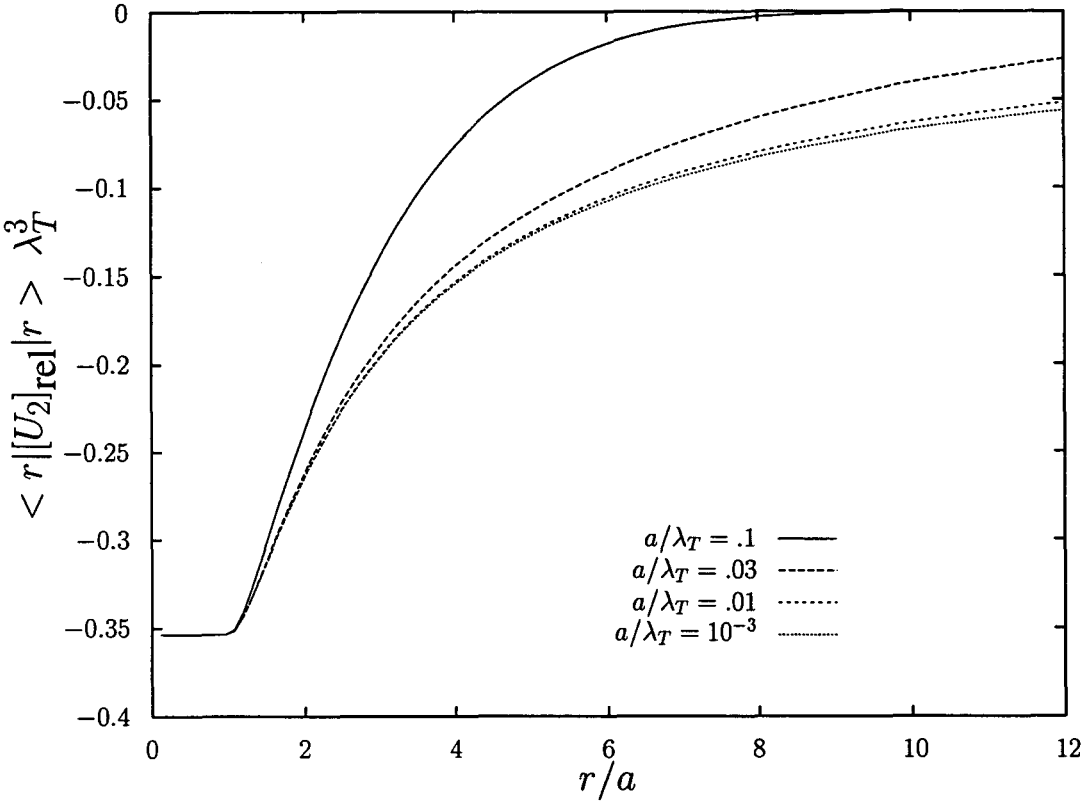


Figure 4.4: Diagonal element of $[U_2]_{\rm rel}$ in space

Variations of the diagonal matrix element $< \mathbf{r} \mid [U_2]_{rel} \mid \mathbf{r} >$ *as a function of* $\mathbf{r}$*, for various values of the parameter* a/λ_T*; at low temperatures, the thermal increase of the range of the operator is clearly visible.*

pseudopotential, and that effective attractions at the surface of a Fermi sphere may appear, independently of the repulsive or attractive character of the potential itself. Moreover, our formalism contains naturally effects such as the statistical exchange between bound molecules and free particles, which may play some role in experiments with alkali atoms at very low temperatures[15–17].

4.6 Calcul des éléments de matrice de U_2 pour un potentiel de sphères dures

Dans cette section nous étudions les expressions des opérateurs $[U_2]_{\rm rel}$ et $\overline{U}_2$ dans le cas particulier d'un potentiel d'interaction dit de sphères dures de diamètre a (defini par (3.88) en remplaçant b par a). Ce type de potentiel permet de modéliser dans une première approximation des systèmes réels qui font intervenir des potentiels composés d'un cœur répulsif à courte distance et d'une faible partie liante;[15] à très basse tempé-

15. Dans certaines situations les resultats obtenus avec cette approximation sont en concordance étonnante avec les expériences même pour des potentiels dont la partie attractive n'est pas limitée dans l'espace.([28, 80]) La fonction de la partie attractive dans ce cas de figure se limite à maintenir la cohésion du système.

rature, comme seulement l'onde partielle $l = 0$ joue une rôle pendant la collision, le paramètre a est donné par la longueur de diffusion. Le potentiel est alors caractérisé par une seule grandeur physique ce qui facilite les raisonnements. Finalement, il permet d'effectuer des calculs analytiques et numérique d'une façon relativement simple.

Nous nous limitons aux systèmes sans potentiel extérieur, de sorte que l'opérateur $\overline{U}_2(1,2) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\beta \mathfrak{H}_0(1)} e^{\beta \mathfrak{H}_0(2)} e^{-\beta \mathfrak{H}_2(1,2)} - 1$ puisse être factorisé en une partie agissant dans l'espace du mouvement du centre de masse et une partie du mouvement relatif des deux particules :

$$\overline{U}_2(1,2) = \overline{U}_2^{\text{CM}} \otimes \overline{U}_2^{\text{rel}} \tag{4.86}$$

La partie $\overline{U}_2^{\text{CM}}$ étant en fait égale à l'opérateur unité, le calcul se réduit à la détermination des élements matrice de la partie relative $\overline{U}_2^{\text{rel}}$. Ainsi que pour l'opérateur $[U_2]_{\text{rel}}$, il ne reste alors résoudre qu'un problème à un corps. En désignant par $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ l'opérateur « distance relative » et par $\mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$ l'opérateur « moment relatif » des deux particules, l'hamiltonien s'écrit pour des particules de masse m :

$$\mathfrak{H}_{\text{rel}} = \mathfrak{H}_{\text{rel}}^{(0)} + V_{\text{int}}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{m} + V_{\text{int}}(\mathbf{r}) \tag{4.87}$$

d'où :

$$\overline{U}_2^{\text{rel}} = e^{\beta \mathfrak{H}_{\text{rel}}^{(0)}} e^{-\beta \mathfrak{H}_{\text{rel}}} - 1 \tag{4.88}$$

$$[U_2]_{\text{rel}} = e^{-\beta \mathfrak{H}_{\text{rel}}^{(0)}} \overline{U}_2^{\text{rel}} = e^{-\beta \mathfrak{H}_{\text{rel}}} - e^{-\beta \mathfrak{H}_{\text{rel}}^{(0)}} \tag{4.89}$$

Les deux opérateurs $\overline{U}_2^{\text{rel}}$ et $[U_2]_{\text{rel}}$ incorporent les effets du potentiel dans notre théorie. Par commodité, nous calculons les élements de matrice diagonaux du premier opérateur dans une base de fonctions propres de $\mathfrak{H}_{\text{rel}}^{(0)}$ et ceux du deuxième dans la représentation position. Pour cela, nous allons déterminer les fonctions propres de $\mathfrak{H}_{\text{rel}}$, insérer aux endroits propices des relations de fermeture sur ces fonctions et calculer le résultat.

Comme il s'agit d'un potentiel central, nous utilisons pour le calcul un volume sphérique $\mathcal{V}$ de rayon R et cherchons des fonction d'onde à symétrie sphérique, $\{\langle \mathbf{r} \mid k, l, m \rangle\}$ pour le système sans et $\{\langle \mathbf{r} \mid k, l, m \rangle_a\}$ pour le système avec interaction. Suivant nos conventions, k est le nombre quantique correspondant à la valeur propre de $\mathfrak{H}_{\text{rel}}^{(0)}$ respectivement $\mathfrak{H}_{\text{rel}}$, $E^{(0)}(k) = E(k) = \hbar^2 k^2/m$, l est le nombre quantique déterminant le carré du moment angulaire $\mathbf{L}^2 = l(l+1)\hbar^2$ et m donne la projection $m\hbar$ du moment angulaire sur un axe choisi, ici l'axe z. (l est un nombre entier positif ou nul; le nombre entier m peut varier entre $-l$ et l).

Les paramètres sans dimension que nous utiliserons sont :

$$\begin{aligned} \alpha &= a/R \\ \gamma &= \lambda_T/R \\ \delta &= a/\lambda_T = \alpha/\gamma \end{aligned} \tag{4.90}$$

Nous posons comme première condition aux limites que les fonctions d'onde s'annullent sur le bord du volume :

$$\forall k,l,m : \langle \mathbf{r} \mid k,l,m\rangle|_{|\mathbf{r}|=R} \equiv \langle \mathbf{r} \mid k,l,m\rangle_a|_{|\mathbf{r}|=R} \equiv 0 \tag{4.91}$$

Pendant tout le calcul nous gardons le volume $\mathcal{V}$ constant et fini; ce n'est qu'à la fin que nous prendrons la limite thermodynamique et que nous vérifierons que les résultats obtenus ne dépendent pas de la taille de ce volume. Ainsi, nous voudrons tenir compte des effets de densité d'état éventuellement induits par le décalage du spectre du système en interaction par rapport au spectre libre. [16]

4.6.1 Les fonctions d'onde

Nous commençons en rappelant les résultats pour le système sans interaction. Ensuite, pour déterminer la base des fonctions d'onde de l'Hamiltonien relatif (4.87), nous cherchons les solutions de l'équation de Schrödinger associée au système relatif, démontrons que les fonctions obtenues sont orthogonales, les normalisons et finalement dérivons la relation de fermeture.

Le système sans interaction

Les fonctions d'onde du système sans interaction satisfont à l'équation de Schrödinger. La symétrie sphérique de l'Hamiltonien autour de l'origine permet la factorisation de la fonction d'onde en une partie angulaire, donnée par la sphérique harmonique $Y_l^m(\hat{r})$, et une partie radiale, $v_l^{(0)}(kr)$:

$$\langle \mathbf{r} \mid k,l,m\rangle = v_l^{(0)}(kr)Y_l^m(\hat{r}) \tag{4.92}$$

La partie radiale est donné par la solution de l'équation de Schrödinger radiale sur l'intervalle $r \in [0;R]$:

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right] v_l(\rho) = 0 \tag{4.93}$$

Dans cette équation nous posons $kr = \rho$. La seule solution, à un facteur multiplicatif près, qui obéit à cette équation aussi à l'origine est donnée par la fonction sphérique de Bessel $j_l(kr)$. En normalisant la fonction d'onde ($\langle k,l,m \mid k,l,m\rangle = 1$), on obtient finalement :

$$\boxed{\langle \mathbf{r} \mid k,l,m\rangle = v_l^{(0)}(kr)Y_l^m(\hat{r}) = \sqrt{\tfrac{2k^2}{R}}\, j_l(kr)Y_l^m(\hat{r})}$$

Le spectre est déterminé par la condition limite (4.91). Pour des rayons R du volume «assez grands », nous utilisons la forme asymptotique de la fonction de Bessel :

$$\lim_{kr\to\infty} j_l(kr) = \frac{1}{kr}\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \tag{4.94}$$

16. En effet, dans la formule de Beth-Uhlenbeck, le seul paramètre du potentiel qui intervient, c'est la différence des densités d'état du système en interaction par rapport au système libre ([42]).

Les vecteurs d'onde k possibles sont alors donné par la condition :

$$kR - l\frac{\pi}{2} = n\pi; \quad n \in \mathbb{N} \tag{4.95}$$

ce qui permet d'énumerer les états propres et de definir le spectre d'energie $E(k) = \hbar^2 k^2/m$ du système libre.

L'équation de Schrödinger du système en interaction

A l'intérieur de la sphère dure ($|\mathbf{r}| < a$), la fonction d'onde $\langle \mathbf{r} \mid k, l, m \rangle_a$ est nulle. A l'extérieur, l'équation de Schrödinger à résoudre correspond à l'équation d'un particule libre avec une condition limite supplémentaire : la solution $\langle \mathbf{r} \mid k, l, m \rangle_a$ doit être continue, en particulier en a : elle doit donc s'annuler pour $r \to a_+$:

$$\forall k, l, m : \langle \mathbf{r} \mid k, l, m \rangle|_{|\mathbf{r}|=a} \equiv 0 \tag{4.96}$$

Comme dans le paragraphe précédent, la fonction d'onde peut se factoriser en un harmonique sphérique pour la position angulaire $\hat{r}$ et une partie radiale :

$$\langle \mathbf{r} \mid k, l, m \rangle_a = v_l(kr) Y_l^m(\hat{r}) \tag{4.97}$$

La partie radiale $v_l(kr)$ est donnée par une combinaison linéaire de solutions de (4.93). On en connaît un système de deux solutions indépendantes et réelles[81] : aux fonctions sphériques de Bessel $j_l(kr)$ déjà introduites on ajoute les fonctions sphériques de von Neumann $n_l(kr)$, toutes les deux définies par exemple par des séries de puissances[82: V.§5] ou par récurrence [81: A_{VIII}.2.b]. Les fonctions d'ordre le plus bas sont :

$$\begin{aligned} j_0(kr) &= \frac{\sin(kr)}{kr} \\ n_0(kr) &= -\frac{\cos(kr)}{kr} \end{aligned} \tag{4.98}$$

La combinaison linéaire de $j_l(kr)$ et $n_l(kr)$ qui satisfait à la deuxième condition aux limites (4.96) nous donne la fonction recherchée :

$$\boxed{v_l(kr) = \begin{cases} N_l(\alpha; ka; R)\,[j_l(ka)n_l(kr) - n_l(ka)j_l(kr)] & r \in [a; R] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}} \tag{4.99}$$

La constante $N_l(\alpha; ka; R)$ est pour le moment arbitraire. Dans la suite, nous la choisirons telle que l'intégrale spatiale du carré de la fonction d'onde soit égale à l'unité.

Deux fonctions d'onde (4.97) différentes sont orthogonales, c'est à dire l'égalité suivante s'applique :

$${}_a\langle k, l, m \mid k', l', m' \rangle_a = 0 \quad \text{si } (k, l, m) \neq (k', l', m') \tag{4.100}$$

Comme les harmoniques sphériques sont orthogonales, il suffit de demontrer cette propriété pour deux fonctions d'onde de (l, m) égaux, mais de valeurs propres $E(k)$ et $E(k')$ différentes. Soient alors $f_l(kr)$ et $g_l(k'r)$ deux solutions différentes de l'équation (4.93). En multipliant l'équation pour $f_l(kr)$ par $(kr)^2\, g_l(k'r)$ et celle pour $g_l(k'r)$ par $(k'r)^2\, f_l(kr)$, l'égalité suivante est obtenue :

$$\begin{aligned} & r^2 g_l(k'r)\, \partial_r^2 f_l(kr) + 2r g_l(k'r)\, \partial_r f_l(kr) + k^2 r^2 f_l(kr) g_l(k'r) \\ = \; & r^2 f_l(kr)\, \partial_r^2 g_l(k'r) + 2r f_l(k'r)\, \partial_r g(k'r) + k'^2 r^2 g_l(kr) f_l(k'r) \end{aligned} \tag{4.101}$$

Intégrant ensuite sur la position r à l'intérieur d'un intervalle $[r_1; r_2]$ contenu dans la domaine de validité de (4.93), on montre l'égalité suivante :

$$\left(k^2 - k'^2\right) \int_{r_1}^{r_2} \mathrm{d}r\, r^2 f_l(kr)\, g_l(k'r) = r^2 \left[f_l(kr)\partial_r g_l(k'r) - g_l(k'r)\partial_r f_l(kr)\right]\Big|_{r_1}^{r_2} \tag{4.102}$$

En conjonction avec les conditions aux limites (4.91) et (4.96), cette relation démontre la validité de (4.100).

Normalisation

Dans ce paragraphe nous allons déterminer la constante $N_l(\alpha; ka; R)$. Nous imposons la condition de normalisation :

$${}_a\langle k, l, m \mid k, l, m\rangle_a = 1 \tag{4.103}$$

cela revient à écrire :

$$\int_a^R \mathrm{d}r\, r^2 \left[v_l(kr)\right]^2 = 1 \tag{4.104}$$

soit :

$$\left[N_l(\alpha; ka; R)\right]^{-2} = \int_a^R \mathrm{d}r\, r^2 \left[j_l(ka) n_l(kr) - n_l(ka) j_l(kr)\right]^2 \tag{4.105}$$

Pour déterminer la constante de normalisation $N_l(\alpha; ka; R)$, nous avons alors besoin de l'intégrale spatiale du produit de deux solutions de l'équation de Bessel avec la même valeur propre. En effet, par calcul du limite $k' \to k$, il est possible de dériver l'égalité suivante pour deux solutions $f_l(kr)$ et $g_l(kr)$ à partir de (4.102) :

$$\int_{r_1}^{r_2} \mathrm{d}r\, r^2 f_l(kr)\, g_l(kr) = \frac{r^3}{2}\left[f_l(kr) g_l(kr) - \frac{1}{2}\left(f_{l-1}(kr) g_{l+1}(kr) + f_{l+1}(kr) g_{l-1}(kr)\right)\right]\Big|_{r_1}^{r_2} \tag{4.106}$$

Pour demontrer cette formule nous avons besoins des rélations suivantes,[17] dans lesquelles b_l

17. Egalités 10.1.19-21,31,32 de [79]

peut être j_l ou n_l :

$$b_{l-1}(z) + b_{l+1}(z) = \frac{(2l+1)}{z}\, b_l(z) \tag{4.107a}$$

$$\mathrm{d}_z b_l(z) = b'(z) = b_{l-1}(z) - \frac{l+1}{z} b_l(z) \tag{4.107b}$$

$$\mathrm{d}_z b_l(z) = b'(z) = \frac{l}{2l+1} b_{l-1}(z) - \frac{l+1}{2l+1} b_{l+1}(z) \tag{4.107c}$$

$$j_l(z) n_{l-1}(z) - j_{l-1}(z) n_l(z) = z^{-2} \tag{4.107d}$$

$$j_{l+1}(z) n_{l-1}(z) - j_{l-1}(z) n_{l+1}(z) = (2l+1) z^{-3} \tag{4.107e}$$

En decomposant f_l en $f_l(kr) = q_f^j\, j_l(kr) + q_f^n\, n_l(kr)$ et g_l de la même façon, on peut deduire de (4.107d) et (4.107e) les égalités suivantes :

$$f_l(z) g_{l-1}(z) - f_{l-1}(z) g_l(z) = \left(q_f^j q_g^n - q_f^n q_g^j\right) z^{-2} \tag{4.107f}$$

$$f_{l+1}(z) g_{l-1}(z) - f_{l-1}(z) g_{l+1}(z) = \left(q_f^j q_g^n - q_f^n q_g^j\right) (2l+1) z^{-3} \tag{4.107g}$$

En posant $\epsilon = k' - k \to 0$, nous linéarisons : $g_l(k'r) \approx g_l(kr) + \epsilon r g_l'(kr)$ et $\partial_r g_l(k'r) = k' g'(k'r) \approx k g_l'(kr) + \epsilon\,[g'(kr) + k r g_l''(kr)]$; pour alléger la notation, nous supprimons pendant cette démonstration l'argument (kr) des fonction j_l, n_l, f_l et g_l; ainsi, le terme d'ordre zéro du membre droit de (4.102) s'écrit :

$$\begin{aligned}
& r^2\,[f_l\, k g_l' - f_l'\, k g]\Big|_{r_1}^{r_2} \\
= \; & r^2 k \left\{ q_f^j\, j_l \left[q_g^j j_l' + q_g^n n_l'\right] + q_f^n\, n_l \left[q_g^j j_l' + q_g^n n_l'\right] \right. \\
& \left. - q_f^j\, j_l' \left[q_g^j j_l + q_g^n n_l\right] - q_f^n\, n_l' \left[q_g^j j_l + q_g^n n_l\right] \right\}\Big|_{r_1}^{r_2} \\
= \; & r^2 k \left\{ q_f^j\, j_l q_g^n n_l' + q_f^n\, n_l q_g^j j_l' \right. \\
& \left. - q_f^j\, j_l' q_g^n n_l - q_f^n\, n_l' q_g^j j_l \right\}\Big|_{r_1}^{r_2}
\end{aligned} \tag{4.108}$$

Avec (4.107b) nous exprimons les dérivées de j_l et n_l en fonction de j_l, j_{l-1}, n_l et n_{l-1}. Les termes en $j_l\, n_l$ se compensent de sorte qu'il ne reste – compte tenu de (4.107f) :

$$\begin{aligned}
& r^2 k \left\{ q_f^j\, j_l q_g^n n_{l-1} + q_f^n\, n_l q_g^j j_{l-1} - q_f^j\, j_l q_g^n n_l - q_f^n\, n_l q_g^j j_l \right\}\Big|_{r_1}^{r_2} \\
& \qquad = r^2 k \left\{ q_f^j\, q_g^n (kr)^{-2} + q_f^n\, q_g^f (kr)^{-2} \right\}\Big|_{r_1}^{r_2} = 0
\end{aligned} \tag{4.109}$$

Pour que la dernière égalité s'applique, il faut que l'intégrale soit definie. Dans la suite, nous allons encore utiliser le fait qu'on peut ajouter des constantes d'intégration arbitraires dans ce cas.

Pour la contribution d'ordre un en ϵ de (4.102), il faut déterminer l'expression suivante :

$$\epsilon k r^3 \left[\frac{1}{kr} f_l g_l' + f_l\, g_l'' - g_l'\, f_l'\right]\Big|_{r_1}^{r_2} \tag{4.110}$$

A partir de (4.107c) et (4.107b), on obtient :

$$\mathrm{d}_z^2 g_l(z) = g_{l-1} \left[\frac{l(l-1)}{z(2l+1)} - \frac{z}{2l+1}\right] + g_{l+1} \left[-\frac{z}{2l+1} + \frac{(l+1)(l+2)}{z(2l+1)}\right] \tag{4.111}$$

d'où il vient :

$$\epsilon k r^3 \left[\frac{1}{kr} f_l g_l' + f_l g_l''\right]\Big|_{r_1}^{r_2}$$
$$= \epsilon k r^3 f_l \left[g_{l-1}\left(\frac{l^2}{kr(2l+1)} - \frac{kr}{2l+1}\right) + g_{l+1}\left(\frac{(l+1)^2}{kr(2l+1)} - \frac{kr}{2l+1}\right)\right]\Big|_{r_1}^{r_2} \quad (4.112)$$

L'autre terme donne :

$$-\epsilon k r^3 f_l' g_l'\Big|_{r_1}^{r_2}$$
$$= -\epsilon k r^3 \left[\left(\frac{l}{2l+1}\right)^2 f_{l-1}g_{l-1} + \left(\frac{l+1}{2l+1}\right)^2 f_{l+1}g_{l+1} - \frac{l(l+1)}{(2l+1)^2}\left(f_{l-1}g_{l+1} + f_{l+1}g_{l-1}\right)\right]\Big|_{r_1}^{r_2} \quad (4.113)$$

En remplacant le f_l de (4.112) par une combinaison linéaire de f_{l-1} et f_{l+1} selon (4.107a), et on additionnant l'équation ainsi obtenue avec (4.113), il vient :

$$\epsilon k r^3 \left\{-\frac{(kr)^2}{2l+1}\left[f_{l-1}g_{l-1} + f_{l+1}g_{l+1}\right]\right. \quad (4.114)$$
$$+ f_{l-1}g_{l+1}\left[-\frac{(kr)^2}{(2l+1)^2} + \frac{(l+1)}{(2l+1)}\right]$$
$$\left. + f_{l+1}g_{l-1}\left[-\frac{(kr)^2}{(2l+1)^2} + \frac{l}{(2l+1)}\right]\right\}\Big|_{r_1}^{r_2}$$

Les termes en $(kr)^2$ se regroupent et donnent :

$$-\epsilon k r^3 f_l g_l\Big|_{r_1}^{r_2} \quad (4.115)$$

Pour les termes restants, nous appliquons (4.107g) au terme en $r^3 f_{l+1}g_{l-1}$, qui devient la somme d'un terme proportionel à $r^3 f_{l-1}g_{l+1}$ et un terme qui ne depend pas de r. Ce dernier donne une contribution nulle à l'intégrale de sorte que nous obtenons après symmétrisation pour l'ordre un en ϵ :

$$\epsilon k r^3 \left\{-f_l g_l + \frac{1}{2}\left[f_{l-1}g_{l+1} + f_{l+1}g_{l-1}\right]\right\}\Big|_{r_1}^{r_2} \quad (4.116)$$

L'équation (4.106) s'obtient maintenant immédiatement. □

En utilisant (4.106), nous obtenons pour la constante de normalisation :

$$[N_l(\alpha; ka; R)]^{-2} = \frac{1}{2k^2}\left(R\left[j_l^2(ka) + n_l^2(ka)\right] - \frac{1}{k^2 a}\right)$$

ou encore :

$$\boxed{N_l(\alpha; ka; R) = \sqrt{\frac{1}{\alpha^2 R^3}\frac{2(ka)^4}{(ka)^2 m_l^2(ka) - \alpha}}} \quad (4.117)$$

Ici, nous avons adopté la définition suivante pour le module des fonctions sphériques j_l et n_l :

$$m_l^2(ka) = j_l^2(ka) + n_l^2(ka) \tag{4.118}$$

Il s'avère[18] que $m_l^2(ka)$ peut être exprimé comme une somme de fonctions rationnelles; en posant $\mu = (2l+1)^2$ la somme s'écrit :

$$(ka)^2 m_l^2(ka) = 1 + \frac{1}{2}\frac{\mu - 1}{(2ka)^2} + \frac{1\cdot 3}{2\cdot 4}\frac{(\mu-1)(\mu-9)}{(2ka)^4} + \frac{1\cdot 3\cdot 5}{2\cdot 4\cdot 6}\frac{(\mu-1)(\mu-9)(\mu-25)}{(2ka)^6} + \ldots \tag{4.119}$$

C'est la forme retenue pour le calcul numérique en section 4.6.3.

Dans le cas de l'onde s, la somme ne consiste d'un terme :

$$(ka)^2 m_{l=0}^2(ka) = 1 \tag{4.120}$$

de sorte que la constante de normalisation devient :

$$N_0(\alpha; ka; R) = \sqrt{\frac{1}{\alpha^2 R^3}\frac{2(ka)^4}{1-\alpha}} \tag{4.121}$$

Pour $a \to 0$, nous retrouvons – en se servant de (4.98)– le résultat de l'onde libre :

$$\begin{aligned}\lim_{a\to 0} v_0(kr) &= \lim_{a\to 0} N_0(\alpha; ka; R)\,[j_0(ka)n_0(kr) - n_0(ka)j_0(kr)] \\ &= \lim_{a\to 0} \sqrt{\frac{k^2}{R}2(ka)^2}\left[\frac{\sin(ka)}{ka}n_0(kr) + \frac{\cos(ka)}{ka}j_0(kr)\right] \\ &= \sqrt{\frac{2k^2}{R}}j_0(kr) = v_0^{(0)}(kr)\end{aligned} \tag{4.122}$$

Le déphasage et le spectre

La condition à la limite (4.91) impose le spectre des valeurs propres E_k de l'hamiltonien $\mathfrak{H}_{\text{rel}}$: seules sont permises les valeurs k qui annullent la fonction d'onde sur le bord du volume. Sur le bord de notre volume, si celui-ci est «assez »grand ($kR \gg 1$), nous pouvons remplacer les fonctions d'onde «en interaction »par leurs formes asymptotiques, ce qui permet d'introduire les déphasages dues au potentiel d'interaction. Il est alors possible d'exprimer les valeurs accessibles de l'énergie E_k en fonction des déphasages.

18. Egalités 9.2.17 et -.28 de [79]

Le déphasage Dans la limite des grandes valeurs de kr, muni des expressions asymptotiques de $j_l(kr)$, (4.94), et $n_l(kr)$:

$$\lim_{kr\to\infty} n_l(kr) = -\frac{1}{kr}\cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \tag{4.123}$$

nous obtenons pour la fonction d'onde radiale :

$$\lim_{kr\to\infty} v_l(kr) = N_l(\alpha; ka; R)\left[-j_l(ka)\frac{\cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)}{kr} - n_l(ka)\frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}\right] \tag{4.124}$$

ce qui peut être mis dans la forme suivante :

$$\lim_{kr\to\infty} v_l(kr) \propto \sin\left[kr - l\frac{\pi}{2} + \eta_l(k)\right] \tag{4.125}$$

dans laquelle le déphasage $\eta_l(k)$ des fonctions d'onde est donné par :

$$\tan\eta_l(k) = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \tag{4.126}$$

Afin de définir le déphasage d'une façon univoque et continue, nous utilisons la convention suivante :

$$\boxed{\eta_l(k) = -\mathrm{m}_l(k)\pi + \text{Arc tan}\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}} \tag{4.127}$$

dans laquelle l'arc tangente peut prendre des valeurs de l'intervalle $]-\frac{\pi}{2};\frac{\pi}{2}]$ et l'« cumulant de phase » $\mathrm{m}_l(k)$ compte le nombre de zéros de $n_l(k'a)$ pour $k' \in [0;k]$.[19] En d'autres termes, $\mathrm{m}_l(k)$ compte le nombre de fois que le arc tangente change de phase $-\frac{\pi}{2}$ à $\frac{\pi}{2}$ si l'extension du potentiel d'intéraction est augmentantée continûment de 0 à a. Des résultats numériques obtenus à partir de cette formule sont représentés sur la figure 4.5.

Pour des grandes énergies E_k, nous pouvons utiliser les formules asymptotiques (4.94 et 4.123) pour déterminer la forme limite du déphasage :

$$\lim_{k\to\infty}\eta_l(k) = -\mathrm{m}_l(k)\pi + \text{atan}\frac{\sin(ka - l\pi/2)}{-\cos(ka - l\pi/2)} = -ka + (l \bmod 2)\frac{\pi}{2} + \Delta\mathrm{m}_l\pi \tag{4.128}$$

$\Delta\mathrm{m}_l$ compte la différence (positive pour des sphères dures) entre le nombre de zéros de $n_l(k'a)$ et celui de sa forme limite $\cos(k'a - l\pi/2)$ pour $k' \in [0;\infty]$ (la fonction $\cos(k'a - l\pi/2)$ atteint le zéro plus souvent que $n_l(k'a)$ pour $l > 1$).

19. Le signe moins devant $\mathrm{m}_l(k)$ est introduit pour tenir compte du caractère répulsif du potentiel.[83: 11.2.1]

Le spectre Selon (4.91), l'égalité suivante doit être vérifiée sur le bord du volume (qui doit être assez grand pour que les approximations (4.94 et 4.123) s'appliquent). Elle impose le spectre d'énergie $E(k)$ du problème à deux corps.

$$kR - l\frac{\pi}{2} + \eta_l(k) = n\pi; \quad n \in \mathbf{N} \tag{4.129}$$

n parcourt l'ensemble de nombres entiers strictement positifs et permet ainsi d'énumérer les énergies accessibles.

Pour l'onde s, l'arc tangente devient égal à $\text{Arc tan}\frac{\sin ka}{-\cos ka} = -ka$ ramené à l'intervalle $]-\frac{\pi}{2};\frac{\pi}{2}]$. En tenant compte du facteur $-\mathrm{m}_l(k)\pi$, nous obtenons le déphasage suivante pour l'onde s :

$$\eta_0(k) = -ka \tag{4.130}$$

Pour grands k, tous les spectres d'ondes partielles différentes se confondent (le cas échéant avec une numérotation légèrement différente), comme est aisément montré en insérant (4.128) dans l'expression (4.129) :

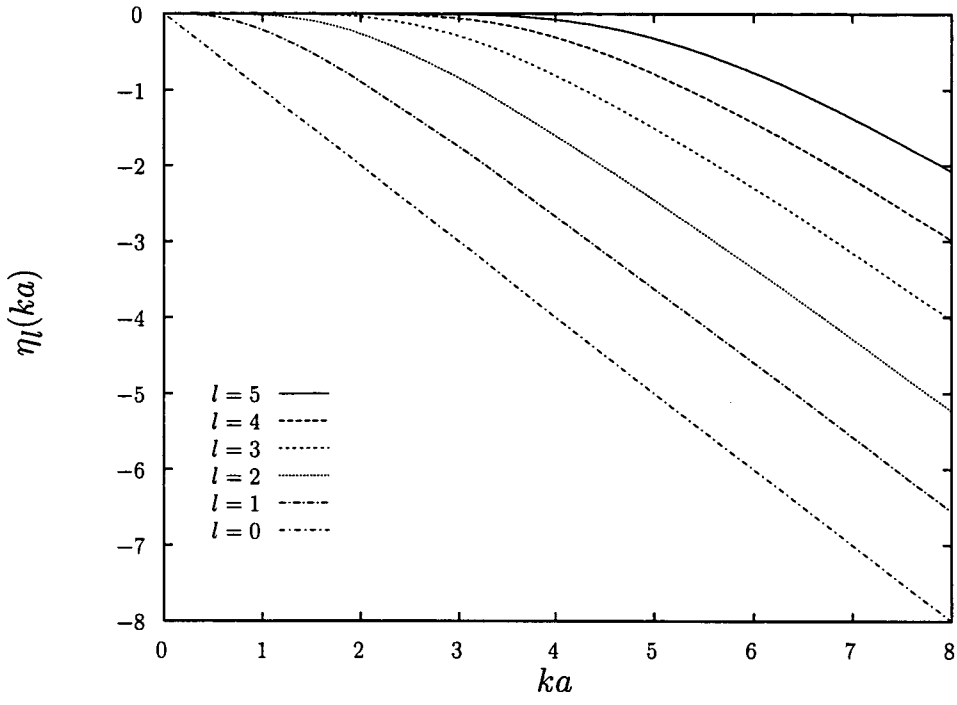
$$\lim_{k\to\infty}\left[kR - l\frac{\pi}{2} + \eta_l(k)\right] = k(R-a) + [(l \bmod 2) - l]\frac{\pi}{2} + \Delta\mathrm{m}_l\pi = n\pi \tag{4.131}$$

ou – en grandeurs sans dimension – :

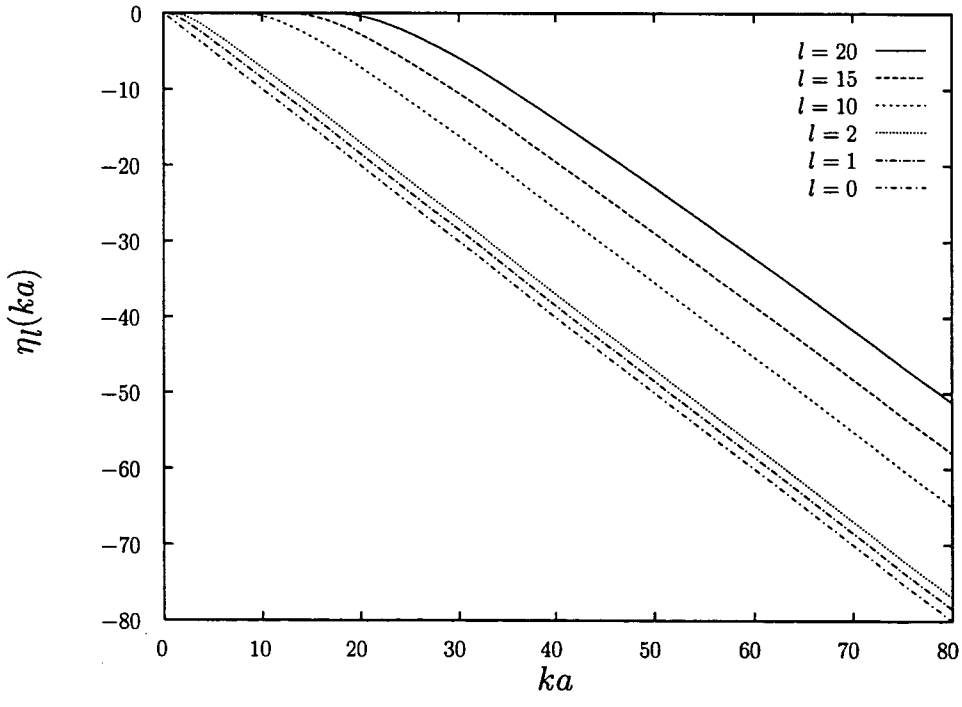
$$ka = \frac{(n - \Delta\mathrm{m}'_l)\,\pi}{1/\alpha - 1} \tag{4.132}$$

Nous avons remplacé dans cette expression $\Delta\mathrm{m}_l$ par $\Delta\mathrm{m}'_l := \Delta\mathrm{m}_l - l \text{ div } 2$. Cette forme limite sera utile pour le calcul numérique en section 4.6.3. La figure 4.6 représente le spectre d'énergie pour quelques ondes partielles.

FIG. 4.5 (*ci-contre*): *Déphasage d'un potentiel de sphères dures*
Sur ces figures nous avons representé les déphasages $\eta_l(ka)$ corréspondants à des ondes partielles $l = 0,\ldots,5$ et $l = 0,1,2,10,15,20$. On remarque que les déphasages $\eta_l(ka)$ atteignent assez rapidement la forme asymptotique $-ka$ + constante.



(a) $l = 0, \ldots, 5$



(b) $l = 0, 1, 2, 10, 15, 20$

FIG. 4.6 (*ci-contre*): *Spectre des fonctions d'onde d'un potentiel de sphères dures*

Sur ces figures nous avons représenté le spectre d'energie $E(n)$ du système en interaction pour des ondes partielles $l = 0, 3, 5$ et 20; les nombres quantiques principaux n vont de 1 à 20 (figure (a)) et de 230 à 300 (figure (b)). L'échelle sur l'axe d'énergie est choisie de façon que la grandeur représentée soit en fait $(ka)^2$ (avec $1/\beta = k_B T$; $\delta = \alpha/\lambda_T$). Pour rendre les écarts entre les ondes partielles plus visibles, nous avons choisi un volume assez petit: $R/a = 10$ (dans les calculs numériques suivants le rapport R/a vaut plutôt 10^5). A basse énergie, la barrière d'énergie centrifuge se manifeste par le fait que déjà le premier niveau de l'onde partielle $l = 20$ a la même énergie que le niveau numéro 14 de l'onde s. Les quatres courbes deviennent parallèles pour des valeurs de n plus élevées. A titre informatif, on a juxtaposé aux spectres du système en interaction représenté par les points ceux du système sans interaction (bien que les lignes soient continues pour mieux guider l'œil, ces spectre sont bien sûr aussi discrets).

Relation de fermeture

Dans la suite, nous aurons besoin d'une « relation de fermeture » qui nous permettra de changer de la base d'ondes libres à la base d'ondes en interaction. Nous allons voir qu'en effet la base de fonctions du type (4.97), $v_l(kr)$ étant donné par (4.99), est complète dans le sous-espace à l'extérieure de la sphère dure.

Comme les harmoniques sphériques sont complètes dans l'espace angulaire (voir par exemple [84: VI.D.1.c.β]), il suffit d'obtenir cette propriété pour les ondes radiales $v_l(kr)$ ([82: II.§1 (6)]). Ces fonctions $v_l(kr)$ sont solutions sur l'intervalle $r \in [a; R]$ de l'équation de Bessel (4.93), qui elle-même est une équation différentielle du type Sturm–Liouville. Par des méthodes du calcul variationel on peut démontrer la fermeture des solutions de cette classe d'équations à l'intérieure de l'intervalle de définition ([82: VI.§§2, 3]) de sorte que l'égalité suivante s'applique pour nos fonctions orthonormées :

$$\sum_k r^2 v_l(kr) v_l^*(kr') = \delta(r - r') \quad \text{pour } r, r' \in]a; R[\tag{4.133}$$

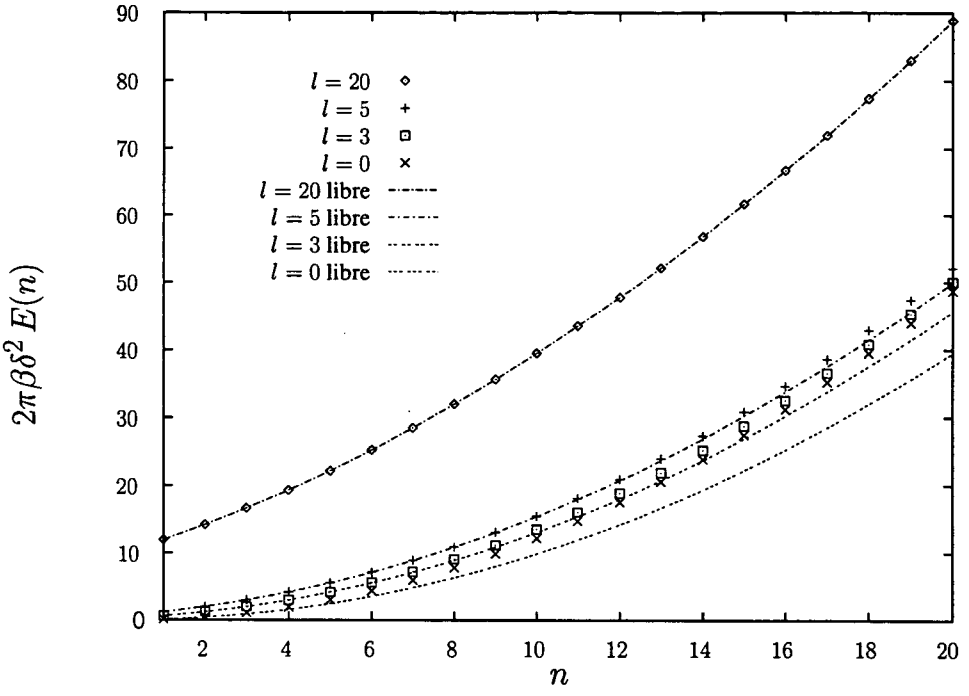
(Ici, comme dans la suite, les sommations sur des vecteur d'onde k ou k' ne portent que sur les valeurs permises.)

Les fonctions $v_l(kr)$ s'annulent à l'intérieur de la sphère dure, ce qui permet d'obtenir une sorte de « relation de fermeture » :

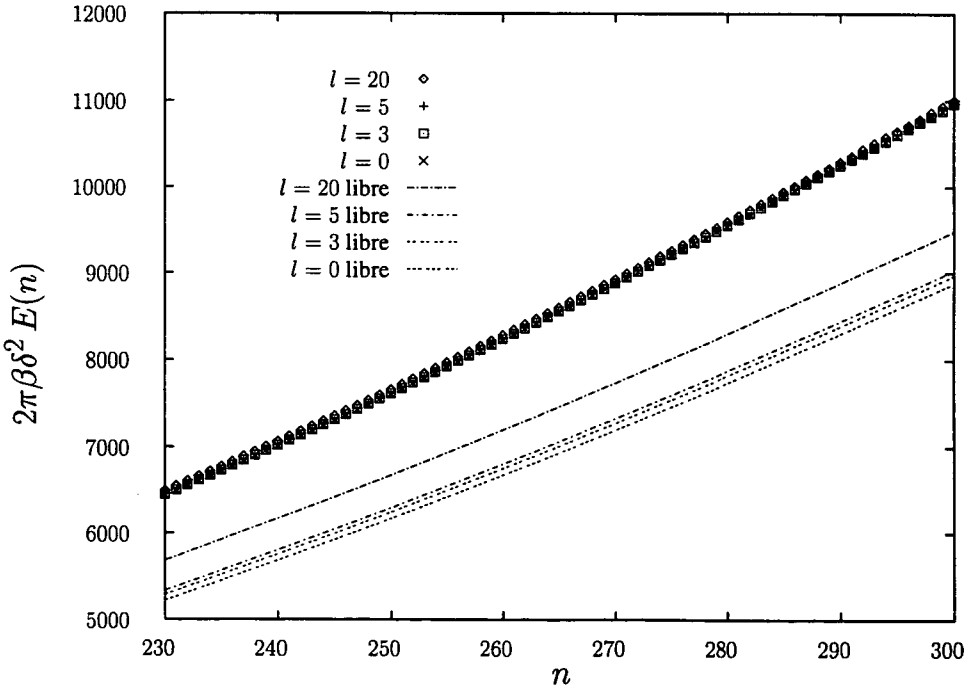
$$\sum_{k,l,m} |k, l, m\rangle_{aa} \langle k, l, m| = \mathcal{P}_{|\mathbf{r}| \in]a;R[} \tag{4.134}$$

où $\mathcal{P}_{|\mathbf{r}| \in [a;R]}$ désigne le projecteur sur le sous-espace à l'extérieur de la sphère.[20]

20. NB: Le diamètre «apparent »de la sphère dans l'espace de mouvement relatif est $2a$.



(a) $n = 1, \ldots, 20$



(b) $n = 230, \ldots, 300$

4.6.2 Les élements de matrice de $[U_2]_{\text{rel}}$ dans la représentation position

En utilisant les résultats de la section précédente, il est maintenant immédiat d'écrire l'élément de matrice diagonal de l'opérateur $[U_2]_{\text{rel}}$ dans la représentation spatiale :

$$\langle \mathbf{r} \mid [U_2]_{\text{rel}} \mid \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{r}|\mathrm{e}^{-\beta \mathfrak{H}_{\text{rel}}}|\mathbf{r}\rangle - \langle \mathbf{r}|\mathrm{e}^{-\beta \mathfrak{H}^{(0)}_{\text{rel}}}|\mathbf{r}\rangle \tag{4.135}$$

L'exponentielle de l'hamiltonien relatif $\mathrm{e}^{-\beta \mathfrak{H}_{\text{rel}}}$ annule toute la partie de la fonction d'onde intérieure à la sphère dure. C'est pourquoi il est possible d'insérer un projecteur $\mathcal{P}_{|\mathbf{r}|\in]a;R[}$ dans le premier braket sans en changer la valeur, et d'ainsi introduire la relation de fermeture (4.134). Tirant profit du fait que les fonctions $\langle \mathbf{r} \mid k,l,m\rangle$ et $\langle \mathbf{r} \mid k,l,m\rangle_a$ sont fonctions propres des Hamiltoniens respectifs, on obtient finalement la grandeur cherchée sous la forme :

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r} \mid U_2^{\text{rel}} \mid \mathbf{r} \rangle &= \langle \mathbf{r}|\mathrm{e}^{-\beta \mathfrak{H}_{\text{rel}}}|\mathbf{r}\rangle - \langle \mathbf{r}|\mathrm{e}^{-\beta \mathfrak{H}^{(0)}_{\text{rel}}}|\mathbf{r}\rangle \\
&= \sum_{k'\in\text{spectre},l',m'} \langle \mathbf{r} \mid k',l',m'\rangle_a \, \mathrm{e}^{-\beta E(k')}{}_a \, \langle k',l',m' \mid \mathbf{r}\rangle \\
&\qquad - \sum_{k\in\text{spectre(libre)},l} \frac{(2l+1)}{4\pi} \mathrm{e}^{-\beta E(k)} \left[\sqrt{\frac{2k^2}{R}} j_l(kr)\right]^2 \\
&= \sum_{k'\in\text{spectre},l'} \frac{2l'+1}{4\pi} \, \mathrm{e}^{-\beta E(k')} \, [v_l(k'r)]^2 - \frac{1}{\left(\sqrt{2}\lambda_T\right)^3}
\end{aligned} \tag{4.136}$$

Nous avons calculé de façon numérique la somme apparaissant dans la dernière ligne. La figure 4.4 en montre les résultats pour des différentes valeurs du paramètre $\delta = a/\lambda_T$.

4.6.3 Les élements de matrice de $\overline{U}_2$ dans la représentation d'impulsion

Pour étudier le comportement de la longueur d'Ursell a_U, qui permet de comparer les résultats de notre méthode avec ceux issus de la théorie des pseudopotentiels, il faut d'abord calculer l'élément de matrice diagonal de l'opérateur $\overline{U}_2^{\text{rel}}$ dans la base d'ondes sphériques libres en volume fini (cf. section 4.4.1) :

$$a_U(k) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, a_U^{(l)}(k) \tag{4.66}$$

avec les longueurs d'Ursell par onde partielle :

$$a_U^{(l)}(k) = -\frac{\pi}{2\lambda_T^2} \left\langle k,l,m \mid \overline{U}_2^{\text{rel}} \mid k,l,m \right\rangle \tag{4.69}$$

Pour calculer ces éléments de matrice, nous suivons la même démarche que dans la section précédente. L'invariance sous rotation nous permet d'écrire :

$$\left\langle k,l,m \mid \overline{U}_2^{\text{rel}} \mid k,l,m \right\rangle = \sum_{k'} |\langle k,l,m \mid k',l,m\rangle_a|^2 \, \mathrm{e}^{\beta[e(k)-e(k')]} - 1 \tag{4.137}$$

Nous avons effectué cette sommation et le calcul du produit scalaire sur ordinateur. Les étapes qui étaient nécessaire pour arriver à des graphes comme en figure 4.2 font l'objet des paragraphes suivants.

Le produit scalaire $\langle k,l,m \mid k',l,m\rangle_a$

L'intégral radial du produit $v_l^{(0)}(kr)v_l^*(k'r)$ se calcule à l'aide de (4.106):

$$\begin{aligned}\langle k,l,m \mid k',l,m\rangle_a &= \sqrt{\frac{2k'^2}{Rm_l^2(k'a)-1/(k'^2a)}}\frac{1}{k'(k'^2-k^2)}v_l^{(0)}(ka)\\ &= \sqrt{\frac{1}{(k'a)^2m_l^2(k'a)-\alpha}}\frac{2\alpha(ka)(k'a)}{(k'a)^2-(ka)^2}j_l(ka) \quad (4.138)\end{aligned}$$

C'est le décalage du spectre d'ondes en interactions qui assure la convergence de

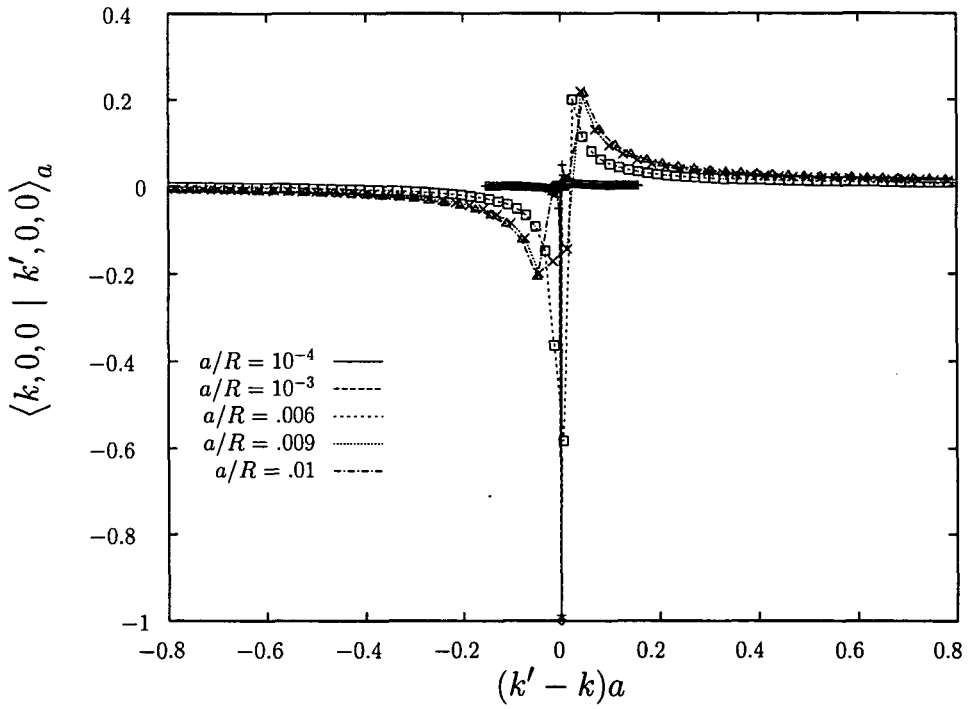


FIG. 4.7 - *Produit scalaire* $\langle k,0,0 \mid k',0,0\rangle_a$

Sur cette figure le produit scalaire $\langle k,0,0 \mid k',0,0\rangle_a$ *est représenté pour différentes tailles de volume* $\mathcal{V}$. *Le produit atteint sa valeur extrême et change de signe pour* $k = k'$. *Dans la limite des grands rayons* R, *la valeur extrême est égale à* ± 1. *Nous n'avons représente le produit que pour l'onde partielle* $l = 0$ *et nombre quantique principale* $n = 50$ ($ka \approx$ *const.*). *La même grandeur pour d'autres ondes partielles converge encore plus rapidement (c'est à dire pour des rayons plus petits) vers une distribution piquée à* $k = k'$. *Pourtant, la somme dans (4.137) ne se reduit pas à un seul terme pour grand* k *parce que le facteur exponentiel peut devenir dominant.*

cette expression quand les deux vecteurs d'onde deviennent égaux : pour que k et k' puissent s'approcher, les formes des spectres (4.95) et (4.129) montrent que le déphasage $\eta_l(k')$ doit atteindre un multiple de π, ce qui demande à la fonction tangent dans (4.127) de s'annuler. Cependant, la tangente s'annule si le numérateur de son argument, c'est à dire la fonction $j_l(ka)$, s'annule, ce qui rend apparent la convergence du produit scalaire même pour vecteurs d'onde égaux. Un calcul précis donne la forme limite suivante :

$$\lim_{k' \to k} \langle k, l, m \mid k', l, m \rangle_a = \frac{n_l(k'a)}{m_l(k'a)} \tag{4.139}$$

ce qui est sensiblement égal au signe de la fonction $n_l(k'a)$ (voir (4.118)). C'est pour cette valeur-là que le produit scalaire atteint sa valeur maximale et change de signe (voir figure 4.7).

Pour l'onde partielle $l = 0$, le résultat s'écrit à l'aide de (4.98) et (4.120) :

$$\langle k, 0, 0 \mid k', 0, 0 \rangle_a = \sqrt{\frac{1}{1-\alpha}} \frac{2\alpha(k'a)}{(k'a)^2 - (ka)^2} \sin(ka) \tag{4.140}$$

Le calcul numérique

Pour déterminer $\left\langle k, l, m \mid \overline{U_2}^{\text{rel}} \mid k, l, m \right\rangle$ nous avons effectué un calcul numérique. Ayant obtenu les intégrales des fonctions sphériques $j_l(kr)$ et $n_l(kr)$ dans les sections précédentes, on pourrait penser que la msie en œuvre numérique ne poserait plus de problème. Toutefois, nous nous sommes heurtés à une difficulté de fond : la somme dans l'expression (4.137) consiste des termes d'ordres de grandeur très différents de sorte qu'il faut prendre garde à l'ordre dans laquelle les opérations s'effectuent. En particulier, le calcul du produit scalaire et du facteur exponentiel au point $k \approx k'$ doit être traité avec beaucoup de soin. En effet, le produit atteint alors presque l'unité par rapport aux termes voisins qui sont des ordres de grandeurs plus petits (voir par exemple l'allure du produit scalaire, qui s'approche d'une distribution de Dirac, sur la figure 4.7). Par conséquent, c'est à ce point qu'il faut effectuer la soustraction du terme 1. En revanche, même ce procédé rencontre ses limites dès que les valeurs du produit scalaire ou du facteur exponentiel deviennent très proche de l'unité, car la représentation des nombres tels que $1 - \epsilon_{\text{min}}$ sur l'ordinateur n'est correcte jusqu'à des ϵ_{min} de l'ordre[21] de $2^{-53} \approx 1,11 \cdot 10^{-16}$. Dans le cas de l'exponentielle, il est possible d'éviter cette contrainte, en se servant du développement en série de $e^{\epsilon} - 1$ plutôt que de calculer la fonction $\exp \epsilon$ et ensuite faire la soustraction dans un deuxième temps. Par contre, pour le produit scalaire, il n'existe pas de forme analytique de $\langle k, l, m \mid k', l, m \rangle_a - 1$ qui peut être calculée numériquement avec assez de précision.

Ici, il s'agit d'une difficulté qui ne peut être résolue que par deux démarches : soit en implémentant des routines de calcul à précision arbitraire ([85: Section 20.6]) soit en

21. Le paramètre ϵ_{min} est déterminé à l'aide du programm MACHAR de [85] pour des variables definies en DOUBLE PRECISION sur les machines SUN.

choisissant les paramètres α et δ tels que le problème n'apparaît pas. La première solution nécessiterait la reprogrammation de toutes les routines de calcul des fonctions sphériques et prolongerait considérablement le temps d'exécution du programme de sorte que nous avons eu recours à la deuxième. C'est pour cette raison que nous avons varié le volume de quantification (le paramètre α) en fonction de δ entre les deux valeurs extrêmes : un volume trop petit donnerait des résultats physiquement incorrects, particulièrement pour des petits vecteurs d'onde (grandes longueurs d'onde), un volume trop grand donnerait des produits scalaires trop proches de l'unité. Pour chaque volume finalement adopté pour le calcul, il a été vérifié que les résultats numériques ne varieront pas pour des paramètres α autour de la valeur utilisée.

Le programme, codé en FORTRAN 77, comprend les parties suivantes :

1. Recherche des zéros de la fonction sphérique de von Neumann, pour définir l'« cumulant de phase » $\mathfrak{m}_l(k')$ nécessaire pour le calcul du déphasage (à une précision de 10^{-9} près; si – plus tard, pendant le calcul des élements de matrice – le déphasage pour une valeur de k' plus proche d'un zéro que 10^{-9} est demandé, le calcul du zéro s'exécutera à la précision de la machine). Environ 128 valeurs par onde partielle sont calculées et enregistrées.

2. Lecture des paramètres α, δ

3. Etablissement d'un tableau des vecteurs d'onde $k'(n)$ permis pour le système en interaction. Typiquement 30000 valeurs sont effectivement déterminées. Pour des n au-delà, la formule asymptotique (4.132) est utilisée. Tout le calcul étant assez sensible aux decalages des spectres, et donc au déphasage, il faut veiller à ce que la valeur du vecteur d'onde correspondant à la valeur de n maximale (ici : 30000) soit bien au-dessus de la valeur k pour laquelle l'élément de matrice doit être déterminé.

4. Le calcul des élements de matrice à l'aide de la formule (4.137). Pour le calcul des fonctions sphériques des routines de [85] et pour le facteur de normalisation $N_l(\alpha; ka; R)$ la formule (4.119) est employée. La soustraction de l'unité s'effectue à la première valeur de k' pour laquelle le produit scalaire $\langle k, l, m \mid k', l, m \rangle_a$ est supérieur à $1/2$ (au « pic »).
   Des blocs de 100 termes sont sommés et ensuite comparés avec la somme des blocs antérieurs. La sommation est arretée dès que le « pic » du produit scalaire est atteint et que le rapport de la somme du bloc et de la différence de la somme des bloques antérieurs et l'unité est inférieure à une valeur limite 10^{-7} :

$$\left| \frac{\text{somme}_n}{1 - \sum_{j=1}^{n-1} \text{somme}_j} \right| < 10^{-7} \tag{4.141}$$

Des aperçus des résultats donnent les figures de cet annexe et ceux du chapitre 4.

Nous avons verifié que les éléments de matrice ainsi calculés satisfont bien à la règle de somme de la formule de Beth-Uhlenbeck : la trace de $\overline{U}_2$ donne le même resultat que l'integration sur k de la formule (1.10).

5. Calcul numérique de température critique d'un gaz de bosons [1]

DANS CE CHAPITRE NOUS DÉTERMINONS la température critique, T_C, de la transition superfluide des gaz bosoniques en présence d'interactions. Cette étude est effectuée par une méthode d'intégration numérique des intégrales de chemin. Nous nous intéressons à la question de savoir si des interactions répulsives (typiquement des sphères dures) augmentent cette température ou, au contraire, la diminuent (à densité du gaz constante). Pour chacune de ces possibilités, on peut trouver des justifications théoriques.

T_C diminue Ce résultat est obtenu par exemple en utilisant la méthode de Hartree-Fock [26: section 28] pour des potentiels pas trop forts, satisfaisant la condition :

$$n\tilde{V}_{\text{int}}(0) \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{5.1}$$

et dans la limite des faibles densités ($n^{1/3}a \ll 1$). Dans ces relations, a est la longueur de diffusion et $\tilde{V}_{\text{int}}(0)$ la transformée de Fourier du potentiel d'interaction pour un moment relatif nul. La valeur de la masse effective $m^\star$ qui entre dans le spectre d'énergie augmente à cause des interactions, de sorte que la température de transition [2] diminue par rapport à la température critique T_0 d'un gaz parfait de la même densité :

$$\frac{\Delta T_C}{T_0} = \frac{T_C - T_0}{T_0} = \frac{m}{m^\star} - 1 = -\frac{1}{3}\frac{ma^2 n\tilde{V}_{\text{int}}(0)}{\hbar^2} < 0 \tag{5.2}$$

Une comparaison avec la transition superfluide du ^{4}He tend à confirmer ce resultat. En effet, la transition se produit à une température nettement plus basse que la température critique du gaz parfait (même si la condition de validité (5.1) n'est pas satisfaite). De plus, une augmentation de la pression, qui rend l'effet des cœurs durs de plus en plus dominant, reduit encore T_C. Aussi considère-t-on souvent cette hypothèse de réduction de la température critique comme la plus vraisemblable.

T_C augmente L'approche de Huang prédit une augmentation de T_C ([56]). Son calcul, qui se base sur l'approche du pseudopotentiel et une transformation de Bogoliubov,

1. Ce travail a été amorcé pendant un séjour à l'université d'Illinois pour lequel nous sommes très reconnaissant envers de notre hôte, le Prof. David Ceperley. Depuis, la collaboration avec lui et son équipe n'a pas cessé.

2. La température de transition est déterminé par la condition que l'énergie du niveau le plus bas soit égale au potentiel chimique μ.

aboutit à une forme de la fonction de partition canonique, qui explicite la sommation sur la fraction de particules condensées ζ :

$$Z_N = \sum_{\zeta=0}^{1} Z(\zeta) \tag{5.3}$$

$Z(\zeta)$ est la fonction de partition d'un système fictif de $N(1-\zeta)$ bosons dans lequel l'état de plus faible énergie (celui que les particules condensées occupent) est rendu inaccessible, mais où l'interaction entre particules du condensat et hors condensat reste possible. Ensuite le logarithme de Z_N est approché par le logarithme du plus grand terme de la sommation (5.3), ce qui revient à traiter la fraction condensée comme une grandeur fixée, sans fluctuations. Il s'avère que la valeur de la fugacité z, à partir de laquelle $\mathrm{Log}Z(0)$ cesse d'être le plus grand terme, est diminuée par rapport à la valeur du gaz parfait par un terme de l'ordre de $O(na^3)^{1/2}$. La variation de la température critique est alors donnée par :

$$1 - \left(\frac{T_0}{T_C}\right)^{3/2} = \mathrm{O}\left(a^3 n\right)^{1/2} > 0 \tag{5.4}$$

ou pour des faibles variations :

$$\frac{\Delta T_C}{T_0} = \mathrm{O}\left(a^3 n\right)^{1/2} > 0 \tag{5.5}$$

Un calcul numérique permet donc de choisir entre ces deux prédictions opposées.

5.1 Les intégrales de chemin

Le formalisme que nous avons élaboré dans les chapitres précédents est essentiellement un développement en densité. Dans cette section nous obtenons un développement similaire permettant, toutefois, de traiter des systèmes plus denses : les intégrales de chemin évaluées par une méthode numérique de *Monte-Carlo Quantique.*[3] Nous utiliserons cette technique afin de calculer la température critique d'un gaz de bosons avec une interaction de sphères dures.

Nous prenons, ainsi qu'au chapitre 2, comme point de départ l'expression de la fonction de partition canonique dans laquelle la symétrisation est explicitée. Cette fois-ci nous évaluons la trace dans une base de position de N particules conforme avec les

3. Pour étudier des systèmes plus denses par les méthodes d'Ursell, il faudrait inclure plus de diagrammes et plus d'opérateurs d'Ursell d'ordre élevé. Nous avons vu des exemples des resommations d'un nombre infini des diagrammes dans le cadre de la formation de paires (section 2.6), tout en se limitant à des opérateurs d'Ursell binaires. L'inclusion d'opérateurs à plus de particules $(U_3, \ldots, U_q)$ nécessiterait la solution des problèmes à q corps. La *méthode du noyau binaire* de Lee et Yang ([44, 45]) en donne un développement en termes d'opérateurs binaires par intégration sur la température inverse β. Néanmoins, la détermination de ces intégrales est compliquée de sorte que les auteurs se limitent à un traitement en ordre dominant dans la longueur de diffusion.

conditions aux limites périodiques, $\{|\mathbf{x}\rangle\}$, où $\mathbf{x}$ est un vecteur à $3 \times N$ composantes $\mathbf{x} = (\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N)$:[4]

$$Z_N = \text{Trace}_{1,\ldots,N} \left\{ {}^{S}_{A}\rho_N^{(\beta)} \right\} = \int_{\vec{x}_i \in \mathcal{V}} \mathrm{d}^{3N}\mathbf{x} \left\langle \mathbf{x} \mid {}^{S}_{A}\rho_N^{(\beta)} \mid \mathbf{x} \right\rangle \tag{5.6}$$

Nous faisons usage de l'opérateur densité à n particules (discernables) $\rho_n^{(\beta)}$ à la température inverse $\beta = 1/(k_B T)$:

$$\rho_n^{(\beta)} = \exp\left[-\beta \mathfrak{H}_n\right] \tag{5.7}$$

Comme dans le formalisme d'opérateurs d'Ursell nous séparons le calcul de Z_N en deux étapes : dans un premier temps, nous cherchons à trouver un traitement des interactions dans un système de particules discernables (calcul de ρ_N), avant d'inclure la symétrisation quantique dans une deuxième phase. En réduisant la densité « effective » du système, c'est-à-dire la densité à laquelle les interactions entre particules sont traitées, il existe, en effet, une façon de réduire l'évaluation de l'opérateur ρ_N à la solution d'un problème à seulement 2 corps.

5.1.1 L'opérateur densité

L'un des ingrédients de base de l'approche d'intégrales de chemin est la propriété suivante des opérateurs densité, qui découle de la définition de la fonction d'exponentielle d'un opérateur et du fait qu'un opérateur commute avec lui-même :

$$\rho_N^{(\beta)} \stackrel{\text{def}}{=} \exp\left[-\beta \mathfrak{H}_N\right] = \exp\left[-\frac{\beta}{2}\mathfrak{H}_N\right] \exp\left[-\frac{\beta}{2}\mathfrak{H}_N\right] \stackrel{\text{def}}{=} \rho_N^{(\beta/2)} \rho_N^{(\beta/2)} \tag{5.8}$$

La température, à laquelle les deux opérateurs densité du membre de droite sont à évaluer, est deux fois plus grande que celle de l'opérateur initial. Par conséquent, la taille du paquet d'onde associé à une particule, la longueur de de Broglie, est réduite (par un facteur $\sqrt{2}$), ce qui revient à dire que le degré de dégénérescence, définie par $n\lambda_T^3$, est abaissée. Nous allons poursuivre ce procédé jusqu'à ce que la densité devienne tellement faible qu'une approximation par opérateurs à deux corps est valide. Généralisant, nous trouvons alors que, pour un M arbitrairement grand, la relation suivante s'applique exactement :

$$\rho_N^{(\beta)} = \left[\rho_N^{(\beta/M)}\right]^M \tag{5.9}$$

Nous cherchons maintenant à évaluer l'élément de matrice diagonal de $\rho_N^{(\beta)}$ dans la base $\{|\mathbf{x}\rangle\}$. Injectant une relation de fermeture entre les deux $\rho_N^{(\beta/2)}$, l'équation (5.8) devient :[5]

$$\left\langle \mathbf{x} \mid \rho_N^{(\beta)} \mid \mathbf{x} \right\rangle = \int \mathrm{d}^{3N}\mathbf{x}(\tau_1) \left\langle \mathbf{x} \mid \rho_N^{(\beta/2)} \mid \mathbf{x}(\tau_1) \right\rangle \left\langle \mathbf{x}(\tau_1) \mid \rho_N^{(\beta/2)} \mid \mathbf{x} \right\rangle \tag{5.10}$$

4. L'intégrale se limite au volume $\mathcal{V}$ du recipient du système. Dans la suite nous allons supprimer cette spécification pour alleger la notation.

5. Nous utilisons la notation $\mathbf{x}(\tau_1)$ pour la position intermédiaire afin d'éviter la confusion avec la coordonnée $\vec{x}_i$ de la première particule. Dans la suite, nous verrons la raison profonde de ce choix.

En segmentant la température β en intervalles de plus en plus petits (en augmentant le paramètre M de la relation (5.9)) nous arrivons finalement à une représentation de l'élément de matrice de $\rho_N^{(\beta)}$ en terme d'intégrale de chemin (introduite par Feynman en mécanique quantique dans les années 40 ([86])):[6]

$$\left\langle \mathbf{x} \mid \rho_N^{(\beta)} \mid \mathbf{x} \right\rangle = \int \left(\prod_{i=1}^{M-1} \mathrm{d}^{3N}\mathbf{x}(\tau_i) \right) \left\langle \mathbf{x} \mid \rho_N^{(\Delta\tau)} \mid \mathbf{x}(\tau_1) \right\rangle \ldots \left\langle \mathbf{x}(\tau_{M-1}) \mid \rho_N^{(\Delta\tau)} \mid \mathbf{x} \right\rangle \tag{5.11}$$

De façon imagée on dit parfois que, pendant chaque tranche de « temps imaginaire » $\Delta\tau = \beta/M$, l'ensemble de particules « voyage » d'un point $\mathbf{x}(\tau_i)$ à un point $\mathbf{x}(\tau_{i+1} = \tau_i + \Delta\tau)$ sous l'influence de l'opérateur densité (équivalent de l'opérateur d'évolution de la mécanique quantique). Après M « tranches », les particules doivent revenir à leurs positions initiales puisque nous calculons un élément de matrice diagonal. Ces chemins peuvent être représentés dans un plan $(\mathbf{x}, \tau)$; un exemple à une dimension est montré sur la figure 5.1. La distance moyenne Δx que chaque particule « parcourt » pendant un temps $\Delta\tau$ est approximativement proportionnelle à la longueur thermique à la température effective $M \cdot T$, c'est-à-dire Δx est $\sqrt{2}^M$ fois plus petite qu'à la température réelle. Chaque particule couvre un volume moyen proportionnel à

$$(\Delta x)^d \sim \left(\frac{\lambda_T}{\sqrt{2}^M} \right)^d \tag{5.12}$$

dans l'espace à d dimensions pendant le temps imaginaire $\Delta\tau$. En réduisant $\Delta\tau$ de plus en plus (en augmentant M), nous arrivons un moment donné à un point, où chaque particule ne peut plus qu'interagir avec une seule des autres comme le recouvrement de trois de ces volumes devient improbable. A cette valeur de $\Delta\tau$ (correspondant à une température inverse β_2) nous pouvons négliger tous les effets à plus de deux corps, et approximer l'opérateur densité à N corps par un produit d'opérateurs à un corps multiplié par un terme de correction dû aux collisions binaires :

$$\forall_{\Delta\tau<\beta_2} \rho_N^{(\Delta\tau)}(1,\ldots,N) \approx \rho_N^{(\text{approx})}(1,\ldots,N) \tag{5.13}$$

$$= \rho_1^{(\Delta\tau)}(1) \otimes \cdots \otimes \rho_1^{(\Delta\tau)}(N) \otimes \prod_{i<j} \frac{\rho_2^{(\Delta\tau)}(i,j)}{\rho_1^{(\Delta\tau)}(i)\rho_1^{(\Delta\tau)}(j)} \tag{5.14}$$

On peut alors réduire le calcul de l'élément de matrice de $\rho_N^{(\beta)}$ au calcul des éléments de matrice de l'opérateur à deux corps $\rho_2^{(\Delta\tau)}$ ainsi qu'à une intégration sur le chemin $\mathbf{x}(\tau_i)$.

Cette approximation devient moins bonne pour une densité élevée du système (mesurée en nombre de particules dans un volume qui est le cube de la portée du potentiel d'interaction).

6. Nous nous limitons ici à une version discrète qui nous suffira. Pour obtenir la version continue, il faut faire tendre M vers l'infini. Les valeurs discrètes $\tau_i = i \cdot \Delta\tau$ se rapprochent alors de plus en plus jusqu'à ce que $\mathbf{x}(\tau)$ décrive un chemin continu dans l'espace des N particules.

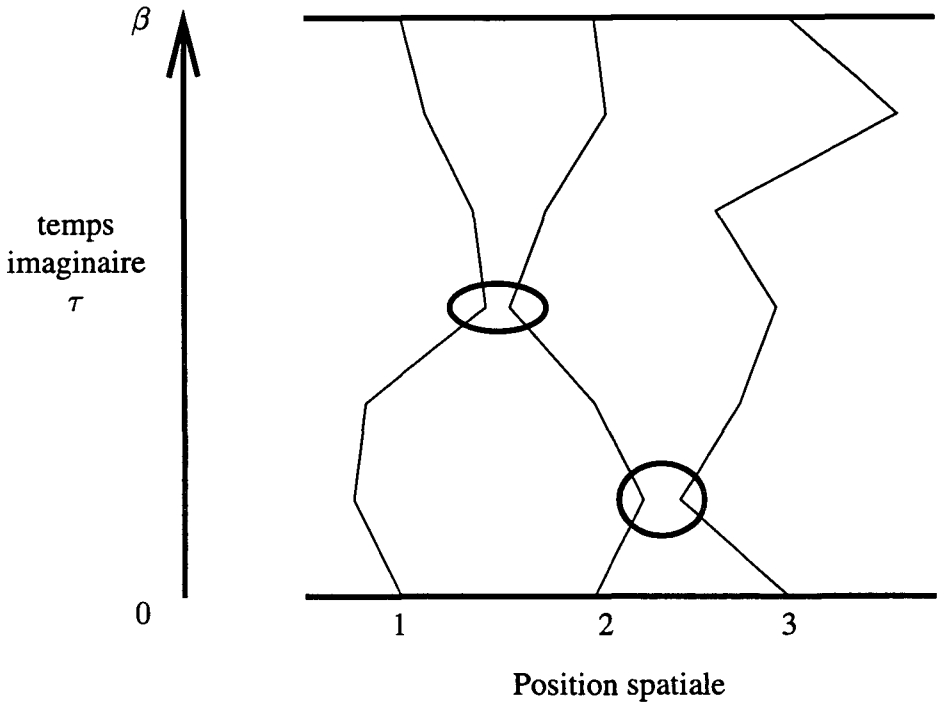


FIG. 5.1 - « *Voyages* » *dans le temps imaginaire*

Exemple des chemins parcourus par trois particules au bout d'un temps imaginaire $\tau = \beta$. *En segmentant le temps total* β, *il est possible de réduire le traitement des interactions aux effets binaires: sur l'ensemble des processus pendant le temps total il y a bien eu lieu d'interaction à trois corps; cependant, les collision binaries sont bien identifiées « sous la loupe ». (Les lignes liant les positions intermédiares* $\mathbf{x}(\tau_i)$ *ne correspondant pas au trajet réel; ils ne sont présentés que pour guider l'œuil du lecteur.)*

A part du cas atypique d'un potentiel de sphères dures (où il est en effet presque impossible qu'une particule, qui s'approche de deux autres, les touche au même instant (imaginaire)), à densité plus importante une configuration initiale telle qu'une particule sent plus d'un autre, devient de plus en plus probable. A ce moment il faut diminuer la température effective encore plus pour pouvoir traiter le système comme un système classique et utiliser l'*approximation primitive* dans laquelle les opérateurs d'énergie cinétique et potentiel commutent ([87]). Cela demanderait une segmentation plus fine de la température et alors plus de temps de calcul numérique. L'ordre de grandeur du rapport entre les températures auxquelles ces deux approximations sont valides est de 10^{-6} pour un gaz de sphères dures et de 10^{-2} pour le ^{4}He ([65]).

Lien avec le développement d'Ursell

Avant d'aller plus loin, comparons la forme approximative (5.14) avec le développement en opérateurs d'Ursell. Transposée dans les notations des opérateurs d'Ursell,

cette approximation devient :

$$\rho_N^{(\beta)}(1,\ldots,N) \approx U_1(1)\ldots U_1(N) \times \prod_{i<j} \left(\overline{U}_2(i,j)+1\right) \tag{5.15}$$

où nous avons utilisé les égalités suivantes :

$$\rho_1^{(\beta)}(1) = U_1(1) \tag{5.16}$$

$$\rho_2^{(\beta)}(1,2) = U_2(1,2) + U_1(1)U_1(2) \tag{5.17}$$

$$= \left[\overline{U}_2(1,2)+1\right] U_1(1)U_1(2) \tag{5.18}$$

d'où :

$$\frac{\rho_2^{(\beta)}(1,2)}{\rho_1^{(\beta)}(1)\rho_1^{(\beta)}(2)} = \overline{U}_2(1,2)+1 \tag{5.19}$$

Comme nous l'avons déjà remarqué, les deux méthodes introduisent, de façon intermédiaire, un système de particules discernables. Les descriptions qu'elles donnent de ce dernier sont analogues, en ce sens qu'elles font appels aux simplifications liées à la faible densité du système. Elles sont cependant également différentes : la méthode des opérateurs d'Ursell considère la température comme fixée, et donc bien évidemment n'introduit pas de « tranches de température » permettant de réduire les effets quantiques de diffraction (liés à la non-commutativité des opérateurs d'énergie cinétique et d'énergie potentielle d'interaction). Techniquement cette différence est bien visible : par exemple, le terme correspondant à une collision à trois corps dans le développement d'Ursell fait apparaître un U_3 tandis qu'il est contenu dans un produit de deux opérateurs $\overline{U}_2$ dans l'approximation binaire des intégrales de chemin (5.15) :

$$\text{Développemenmt d'Ursell} \Leftrightarrow \text{Approximation binaire} \tag{5.20}$$

$$U_3(1,2,3) \Leftrightarrow \overline{U}_2(1,2)\overline{U}_2(1,3) \tag{5.21}$$

Par l'introduction d'une température effective, plus élevée que la température réelle, le formalisme des intégrales de chemin réussi alors à inclure tous les termes du développement en agrégats avec le désavantage de perdre la possibilité de calculs analytiques.

Le cas particulier des sphères dures

Revenons maintenant à l'approximation (5.11). Pour la déterminer nous avons besoin de connaître l'opérateur densité à deux corps. Dans le cas du potentiel de sphères dures auquel nous nous intéressons, il existe une forme exacte de cet opérateur. Comme nous l'avons déjà vu au chapitre précédent (4.6), les fonctions propres et les valeurs propres de l'hamiltonien sont parfaitement connues et calculables (l'élément de matrice de $[U_2]_{\text{rel}}$ de la figure 4.4 donne l'allure de l'élément de matrice diagonal de ρ_2 à une constante additive et un facteur multiplicatif près). La forme exacte qui fait intervenir des fonctions de Bessel et de von Neumann a seulement un problème : l'idée de la

présente approche est d'augmenter la température « effective » afin de pouvoir utiliser l'approximation binaire. A ces température, cependant, il faut tenir compte d'un grand nombre d'ondes partielles ce qui mène à des difficultés numériques. Cependant, des expressions approximatives existent, et nous utilisons celle de Cao et Berne ([88]) :

$$\left\langle \vec{R},\vec{r} \mid \frac{\rho_2^{(\beta)}}{\rho_1^{(\beta)}\rho_1^{(\beta)}} \mid \vec{R}',\vec{r}' \right\rangle = 1 - \frac{a(u-a)}{rr'} \mathrm{e}^{-i\left[D-(\vec{r}-\vec{r}')^2\right]/4\lambda_T^2} \tag{5.22}$$

avec :

$$D = u^2 - 2au + 2a^2 - 2a(u-a)\cos\measuredangle\left(\vec{r},\vec{r}'\right) \tag{5.23}$$

et où u est la somme des distances entre les particules du bra et du ket :

$$u = (|\vec{r}| + |\vec{r}'|) \tag{5.24}$$

Ces auteurs ont obtenu ce résultat en utilisant une approximation de haute température : les fonctions sphériques, qui apparaissent dans la forme exacte de ρ_2 (voir (4.136) en combinaison avec (4.99)), sont remplacées par leurs formes asymptotiques valables pour des grandes impulsions relatives k ($ka \gg 1$). Ensuite l'intégration sur k est effectuée de manière analytique.

Nous réduisons alors l'évaluation de $\langle \mathbf{x} \mid \rho_N \mid \mathbf{x} \rangle$ à une intégration sur les positions intermédiaires $\mathbf{x}(\tau_i)$ des éléments de matrice du type

$$\left\langle \mathbf{x}(\tau_i) \mid \rho_N^{(\mathrm{approx})} \mid \mathbf{x}(\tau_{i+1}) \right\rangle$$

Dans la pratique nous utilisons $M = 5$ tranches de temps imaginaire; avec l'opérateur densité exact ce nombre pourrait descendre jusqu'à 1 (à faible densité) ([65]). Pour fixer les idées nous appellerons $\mathbf{x}(\tau_{i=0})$ la coordonnée du bra de $\langle \mathbf{x} \mid \rho_N \mid \mathbf{x} \rangle$ et $\mathbf{x}(\tau_{i=M})$ celle du ket; dans le cas d'un élément de matrice diagonal les deux coïncident : $\mathbf{x}(\tau_{i=0}) = \mathbf{x}(\tau_{i=M})$. La façon la plus simple de calculer les intégrales de chemin est la suivante : partant d'une position initiale $\mathbf{x}(\tau_i)$ nous tirons des nouvelles positions $\mathbf{x}(\tau_{i+1})$ selon une loi gaussienne pour la différence des deux coordonnées (dans l'espace à $3N$ dimensions), la largeur de la Gaussienne étant donnée par la longueur thermique apparente. Cette loi de probabilité transpose l'effet des opérateurs densité à un corps qui apparaissent dans (5.14) :

$$\langle \vec{x} \mid \rho_1 \mid \vec{x} \rangle \sim \exp\left(-\left[\vec{x}(\tau_i) - \vec{x}(\tau_{i+1})\right]^2 / \left[2^{-M/2}\lambda_T\right]^2\right) \tag{5.25}$$

de sorte que l'intégrant lui-même ne consiste plus que du produit d'opérateurs binaires donnant la correction à la distribution de particules libres. Pour améliorer la vitesse de convergence, nous utilisons dans nos calculs une méthode plus évoluée : la méthode de *bisection avec rejet aux niveaux intermédiaires* ([89]). Le chemin de $\mathbf{x}(\tau_0)$ à $\mathbf{x}(\tau_M)$ se construit, en fait, à partir des deux bouts; dans un premier temps, la position au milieu, $\mathbf{x}(\tau_{M \text{ div } 2+1})$, est déterminée selon une loi gaussienne pour la distance entre $\mathbf{x}(\tau_{M \text{ div } 2+1})$ et $[\mathbf{x}(\tau_0) + \mathbf{x}(\tau_M)]/2$. Si cette position intermédiaire est rejetée

à cause du facteur correctif faisant intervenir l'interaction (par exemple, si deux particules se coupent dans le cas du potentiel de sphères dures), une nouvelle position est cherchée et le cycle recommence. Si, en revanche, cette position $\mathbf{x}(\tau_{M \text{ div } 2+1})$ est acceptée, le même procédé est appliqué aux deux bisections $\mathbf{x}(\tau_0) - \mathbf{x}(\tau_{M \text{ div } 2+1})$ et $\mathbf{x}(\tau_{M \text{ div } 2+1}) - \mathbf{x}(\tau_M)$. De cette manière, plus de chemins ayant un poids élevé dans la somme (5.11) sont construits par unité de temps de calcul et des chemins impossibles rapidement écartés. Après un certain nombre de tirages nous obtenons une estimation statistique de $\langle \mathbf{x} \mid \rho_N \mid \mathbf{x} \rangle$, dont la déviation standard nous fournit des indications sur la convergence de cette opération.

5.1.2 Symétrisation

Nous avons également à tenir compte des opérateurs de symétrisation qui apparaissent dans (5.6). Sous leur effet les positions des particules discernables du ket de l'intégrale de (5.6) sont permutées. Ainsi, ces opérateurs permettent-ils aux particules d'arriver – au bout du temps β – à un autre point que leur point de départ. Par exemple il est possible, sous l'influence d'un opérateur d'échange agissant sur les particules 1 et 2, que la particule numéro 1 arrive à la position de départ de la particule 2 et vise versa :

$$\vec{x}_1(\tau_{i=M} = \beta) = \vec{x}_2(\tau_{i=0} = 0) \text{ et } \vec{x}_2(\beta) = \vec{x}_1(0) \tag{5.26}$$

Cette opération introduit alors des éléments de matrice non-diagonaux de ρ_N.

Nous résumons les étapes du calcul de Z_N : une configuration de départ $\mathbf{x}(0)$ est tirée; ensuite nous calculons de manière statistique les éléments de matrice de $\left\langle \mathbf{x}(0) \mid \rho_N^{(}\beta) \mid \mathbf{x}(\beta) \right\rangle$ pour différentes configurations $\mathbf{x}(\beta)$ issues de $\mathbf{x}(0)$ par permutation de particules; dans cette partie nous utilisons l'approximation binaire (5.14) pour les termes intermédiaires de (5.11); finalement nous établissons la moyenne sur différentes $\mathbf{x}(0)$ et obtiennent une éstimation pour la fonction de partition de notre système Z_N.

5.2 Repérage de la transition

Afin de déterminer la température critique de la transition superfluide, nous avons recours à la compréhension de la phase superfluide en termes de cycles d'échange introduite par Feynman et aux méthodes d'*extrapolation par changement d'échelle* (*finite-size scaling*).

Feynman interprète l'apparition d'une structure superfluide en termes d'agrégats ou de cycles d'échange ([90, 91]). Dans notre vision en termes d'intégrales de chemin, un cycle d'échange se présente comme une boucle formée des chemins d'un nombre de particules (ceux contenu dans un opérateur d'échange) parcourus pendant le temps imaginaire β. Par exemple, une particule (numérotée 1) peut arriver au point de départ de la particule 5 dont la position finale correspond à la position initiale de la particule 8; puis cette particule revient à la position initiale de la particule 1 (voir figure 5.2). Les trois particules font alors partie d'un cycle d'échange d'ordre 3. Feynman considère le mouvement sans friction comme la manifestation d'une corrélation à l'échelle

macroscopique, due aux effets de la symétrie statistique. Dans un système peu dégénéré ce sont les termes correspondant aux courtes permutations qui ont le poids le plus fort dans des expressions comme (5.6). En revanche, à température plus basse, à dégénérescence plus forte, les contributions des termes de cycles d'échange plus longs deviennent de plus en plus importantes. Finalement, les cycles pertinents atteignent une taille macroscopique (ils s'étendent d'un bord du récipient à l'autre) et la structure superfluide s'établit. Cette interprétation est d'ailleurs très proche de celle que donnent les opérateurs d'Ursell.

5.2.1 Densité superfluide

Nous résumons dans cette section une discussion que l'on peut trouver par exemple dans [92].

Le flux superfluide et le flux normal se distinguent selon la réponse des particules à un mouvement des parois. La partie normale d'un fluide, contenu dans un récipient cylindrique tournant autour de l'axe de symétrie, est entraînée dans le mouvement de rotation, alors que la fraction superfluide reste immobile.[7] Afin de définir les propriétés de notre système, nous plaçons par l'esprit le liquide entre deux cylindres concentriques. Ensuite nous faisons tourner les cylindres à une vitesse $v = \omega R$. Nous supposons que la distance entre les deux bords est très petite par rapport au rayon du cylindre intérieur R de sorte que les effets centrifuges peuvent être négligés. Ce système correspond à un système à deux dimensions, périodique dans une des directions (que nous appelons $\vec{z}$) et retenu par des bords (en mouvement à vitesse $\vec{v}$ ($\|\vec{z}$)) dans l'autre dimension.

On définit alors la *fraction normale* ρ_N/n comme étant la fraction de particules qui participent au mouvement :

$$\frac{\rho_N}{n} = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{Nm\vec{v}} = \frac{1}{Nm\vec{v}} \frac{\mathrm{Trace}_{1,\ldots,N} \{\mathbf{P}\rho_{\vec{v}}\}}{\mathrm{Trace}_{1,\ldots,N} \{\rho_{\vec{v}}\}} \tag{5.27}$$

$\mathbf{P}$ est l'opérateur d'impulsion totale :

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^{N} \vec{p}_i \tag{5.28}$$

et $\rho_{\vec{v}}$ l'opérateur densité du système en mouvement :

$$\rho_{\vec{v}} = \exp\left[-\beta\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{(\vec{p}_i - m\vec{v})^2}{2m} + \sum_{i<j} V_{\mathrm{int}}(i,j)\right)\right] \tag{5.29}$$

La *fraction superfluide* ρ_S/n est alors égale à la partie restante immobile :

$$\frac{\rho_S}{n} = 1 - \frac{\rho_N}{n} \tag{5.30}$$

7. Dans l'expérience par Hess et Fairbank ([93]), qui a mis en évidence cette différence de comportement, un recipient d'hélium liquide est mis en rotation à une température plus élevée que la température critique (la vitesse angulaire étant très faible pour éviter la formation de vortex). En diminuant la température, ces auteurs observent un changement caractéristique du moment d'inertie lors du passage du point critique.

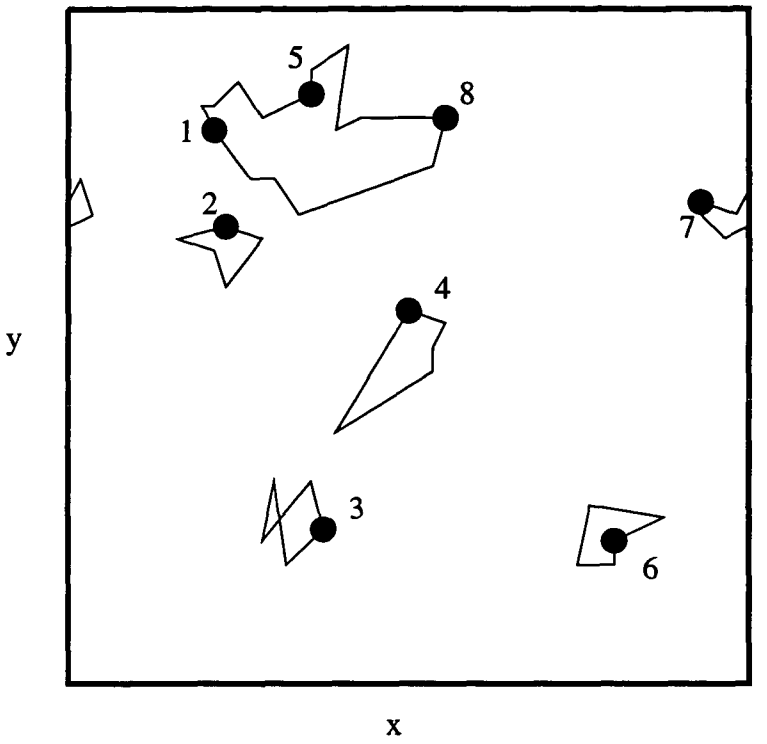


FIG. 5.2 - *Exemple des chemins parcourus*

Sur cette figure nous donnons l'exemple de huit particules qui se deplacent pendant un temps imaginaire β dans un système à deux dimensions, avec des conditions aux limites périodiques. Nous utilisons $M = 5$ tranches de temps. Le deplacement de la particule 7 devient possible par les conditions aux limites périodiques (ces conditions aux limites correspondent à un tore à deux dimensions). Les particules 1, 5 et 8 font partie d'un cycle d'échange: $\vec{x}_1(0) = \vec{x}_5(\beta)$, $\vec{x}_5(0) = \vec{x}_8(\beta)$, $\vec{x}_8(0) = \vec{x}_1(\beta)$. Dans la phase condensée la taille des cycles d'échange devient comparable à la taille du recipient. (Comme sur la figure précedente, les lignes ne représentent pas les trajets réels, mais lient seulement les points intermédiaires.)

Calculons maintenant le changement de l'énergie libre

$$F_{\vec{v}} = -\beta^{-1} \operatorname{Log} [\operatorname{Trace} \{\rho_{\vec{v}}\}] \tag{5.31}$$

pour une petite perturbation de la vitesse $\vec{v}$. En première approximation il est possible d'exprimer la fraction superfluide par :

$$N m\vec{v} \left(\frac{\rho_S}{n}\right) = N m\vec{v} \left(1 - \frac{\rho_N}{n}\right) = N m\vec{v} - \frac{\operatorname{Trace}_{1,\ldots,N} \{\mathbf{P}\rho_{\vec{v}}\}}{\operatorname{Trace}_{1,\ldots,N} \{\rho_{\vec{v}}\}}$$
$$\approx -\frac{\partial}{\beta \partial \vec{v}} \operatorname{Log} [\operatorname{Trace}_{1,\ldots,N} \{\rho_{\vec{v}}\}] = \frac{\partial F_{\vec{v}}}{\partial \vec{v}} \tag{5.32}$$

Nous obtenons alors :

$$\frac{\Delta F_{\vec{v}}}{N} \approx m\vec{v}\Delta\vec{v} \left(\frac{\rho_S}{n}\right) \tag{5.33}$$

Pour des faibles vitesses de rotation, nous obtenons la différence d'énergie libre du système en rotation avec celle du système au repos :

$$\frac{\Delta F_{\vec{v}}}{N} \approx \frac{1}{2} m \vec{v}^2 \left(\frac{\rho_S}{n}\right) \tag{5.34}$$

et retrouvons un résultat connue des flux classiques ($\rho_S = 0$) : l'énergie libre à l'équilibre ne dépend pas d'un mouvement uniforme des parois.

Le calcul de $\Delta F_{\vec{v}}$ (pour faibles vitesses $\vec{v}$) dans le cadre du présent formalisme est réalisé de la façon suivante. On peut introduire une transformation unitaire pour exprimer $\rho_{\vec{v}}$ en fonction de l'opérateur densité au repos ρ :[8]

$$\rho \stackrel{\text{def}}{=} \exp\left[-\beta\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \sum_{i<j} V_{\text{int}}(i,j)\right)\right] \tag{5.35}$$

par :

$$\rho_{\vec{v}} = \exp\left[i\frac{m}{\hbar}\vec{v}\cdot\sum_{i=1}^{N}\hat{\vec{r}}_i\right] \times \rho \times \exp\left[-i\frac{m}{\hbar}\vec{v}\cdot\sum_{i=1}^{N}\hat{\vec{r}}_i\right] \tag{5.36}$$

(ici, $\hat{\vec{r}}_i$ note l'opérateur position). Dans le cas des éléments de matrice diagonaux $\langle \mathbf{r} \mid \rho_{\vec{v}} \mid \mathbf{r}\rangle$ (où la base de positions $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ne tient pas compte de la périodicité du système), le produit des éléments de matrice des opérateurs exponentiels vaut l'unité. En revanche, les conditions aux limites permettent que le trajet dans le temps imaginaire mène une particule (ou, le cas échéant, la particule qui la remplace après permutation) à une position finale qui est déplacée par un vecteur de symétrie du système $\vec{L}$ (ou un multiple) par rapport à la position de départ. Ces éléments de matrice non-diagonaux de $\rho_{\vec{v}}$ peuvent alors acquérir une phase supplémentaire :

$$\begin{aligned}&\left\langle \vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_j,\ldots,\vec{r}_N \mid \rho_{\vec{v}} \mid \vec{r}'_1,\ldots,\vec{r}'_j+\vec{L},\vec{r}'_{j+1},\ldots,\vec{r}'_N\right\rangle \\ &\quad = \exp\left[-i\frac{m}{\hbar}\vec{v}\cdot\vec{L}\right]\left\langle \vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_j,\ldots,\vec{r}_N \mid \rho_{\vec{v}} \mid \vec{r}'_1,\ldots,\vec{r}'_j,\vec{r}'_{j+1},\ldots,\vec{r}'_N\right\rangle\end{aligned} \tag{5.37}$$

Afin d'inclure d'une façon commode cette phase dans notre traitement, nous définissons le vecteur du *nombre d'enroulement* $\mathbf{W}$ comme le flux des chemins à travers les bords du container multiplié par la taille de la boîte dans cette direction :

$$\mathbf{W} = \sum_{i=1}^{N} \left(\vec{r}_{\mathcal{P}_i}(\beta) - \vec{r}_i(0)\right) \tag{5.38}$$

A partir de cette définition nous déterminons le changement d'énergie libre $\Delta F_{\vec{v}}$ dû au mouvement (lent) des parois :[9]

$$e^{-\beta\Delta F_{\vec{v}}} = \frac{\text{Trace}_{1,\ldots,N}\{\rho_{\vec{v}}\}}{\text{Trace}_{1,\ldots,N}\{\rho\}} = \left\langle \exp\left[-i\frac{m}{\hbar}\vec{v}\cdot\mathbf{W}\right]\right\rangle \tag{5.39}$$

8. Nous supprimons l'indice indiquant le nombre de particules N pour éviter la confusion avec la densité normale.

9. Nous rappelons que la trace porte sur les états conformes avec les conditions aux limites; elle tient notamment compte de la propriété de périodicité du système.

Pour des vitesses faibles nous trouvons alors à partir de (5.34) et compte tenu de l'invariance par rotation :

$$\frac{1}{2}Nm\vec{v}^2\frac{\rho_S}{n} \approx \Delta F_{\vec{v}} \approx \beta^{-1}\frac{m^2}{2\hbar^2}\langle(\vec{v}\cdot\mathbf{W})^2\rangle = \beta^{-1}\frac{m^2}{2\hbar^2}\frac{\vec{v}^2\langle\mathbf{W}^2\rangle}{3} \tag{5.40}$$

La valeur moyenne sur l'ensemble thermodynamique $\langle W^2\rangle$ nous donne alors la fraction superfluide ([92]) :

$$\boxed{\frac{\rho_s}{n} = \frac{2\pi}{3N}\frac{\langle W^2\rangle}{\lambda_T^2}} \tag{5.41}$$

L'extrapolation par changement d'échelle

Comme les systèmes que nous pouvons traiter par des méthodes numériques sont évidemment de taille finie, il est nécessaire de faire une extrapolation vers des systèmes à la limite thermodynamique. A ce but nous faisons usage des résultats de la théorie d'*extrapolation par changement d'échelle*. A partir de la *forme d'extrapolation* (*scaling form*) de la fraction superfluide que nous obtenons dans la suite, il est en effet possible de trouver un premier critère de la transition superfluide. Lorsque le système est proche du point de transition, $T \approx T_C$ (rappelons que T_C désigne la température critique dans la limite thermodynamique quand le volume L^3 du système tend vers l'infini), une quantité thermodynamique ne peut dépendre de la température que par l'intermédiaire du rapport $y = L/\xi(T)$ entre la taille du récipient L et la longueur de corrélation $\xi(T)$ ([94]) :

$$\rho_S(t, L)/n \sim L^{\varkappa}Q(y) \tag{5.42}$$

La fonction Q_P est inconnue, mais analytique pour un argument y fini, puisqu'un système fini ne subit pas de transition de phase. L'exposant $\varkappa$ se détermine en examinant les exposants critiques des quantités en jeu. Soit

$$t = (T - T_C)/T_C \tag{5.43}$$

la température relative et v et ν les exposants critiques de la fraction superfluide et de la longueur de corrélation dans la limite thermodynamique :

$$\begin{aligned} \rho_S(t)/n|_{t\approx 0} &\sim t^v \\ \xi(t)|_{t\approx 0} &\sim t^{-\nu} \end{aligned} \tag{5.44}$$

Dans la limite thermodynamique $\rho_S(t, L)/n|_{t\approx 0}$ devient proportionnel à t^v. y varie comme Lt^{ν}, alors le terme dominant de $Q(y)$ doit être donné par $y^{v/\nu}$, ce qui aboutit à la valeur $\varkappa = -v/\nu$.

Au point critique avec $t \approx 0$, $Q(0)$ est constant, la fraction superfluide varie alors comme $L^{\varkappa}$ avec la taille du système. L'exposant $\varkappa$ est proche de -1, comme l'a montré l'expérience pour le ^{4}He ([95]), la théorie du groupe de renormalisation ([96])[10]. Nous trouvons donc le premier critère pour la température critique ([97]) :

$$\boxed{L\,\rho_S(T = T_C, L)/n = \text{constante}} \tag{5.45}$$

10. Faute de temps nous n'avons pas réussi à comprendre la suite des arguments et calculs qui ont mené à ce resultat.

Si nous représentons donc, en fonction de la température, la fraction superfluide, à densité na^3 constante, multipliée par la taille du système L, les courbes des différentes valeurs de L se croisent à la température critique.

En fait, le raisonnement précédent n'est strictement valable que pour des systèmes très grands. Pour des petites tailles, la température du passage vers la phase condensée pour le système fini, par exemple déterminée à partir de la courbe de la capacité calorifique en fonction de la température, est décalée par rapport à la température T_C de la limite thermodynamique. On s'attend alors à ce que la fonction $Q(y)$ dépende de L. A proximité de la température critique, $t \approx 0$, ces corrections sont de l'ordre $L^{-\Delta/\nu}$ ([94: III.C]). La correction Δ à l'exposant d'extrapolation pour le ^{4}He est proche de $0,52$ ([96]).

Sur la figure 5.3 nous donnons un exemple des courbes obtenues par le calcul numérique pour une densité de $na^3 = 5 \cdot 10^{-3}$.

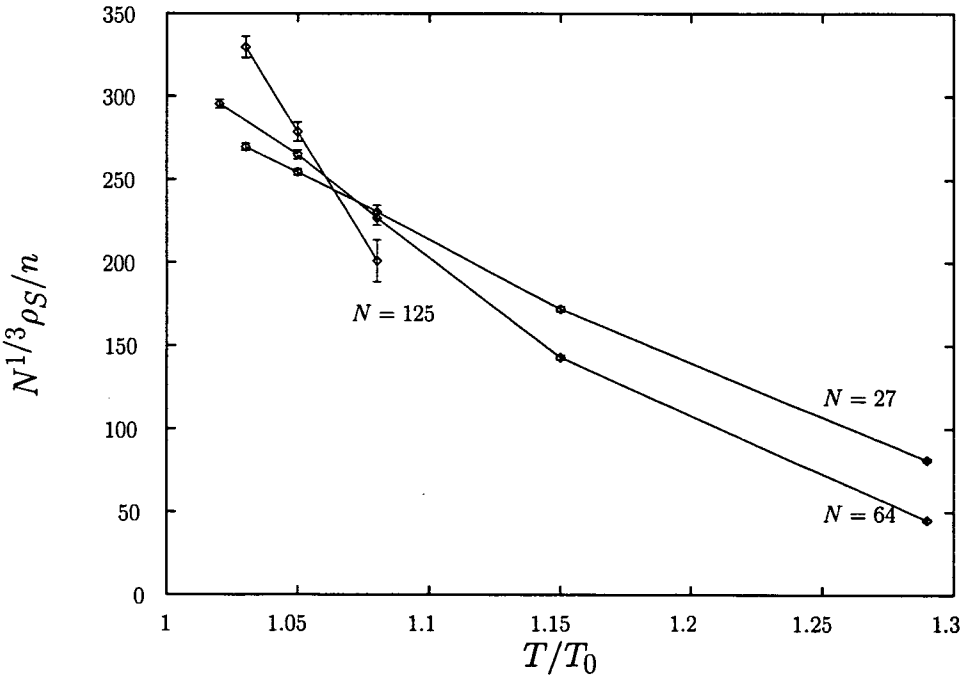


FIG. 5.3 - *Fraction superfluide sous forme invariante d'échelle à $T = T_C$*

ρ_S est la densité superfluide, N le nombre de particules, n leur densité $n = N/L^3$ ($= 5 \cdot 10^{-3}a^{-3}$ dans notre exemple), T/T_0 la température en unités de la température de condensation du gaz parfait. Nous multiplions la fraction superfluide par la racine cubique du nombre de particules (qui est proportionelle à la taille du système dans une dimensions L) pour obtenir la forme d'extrapolation. Comme prédit, les courbes correspondant à différentes tailles de système se croisent à une valeur de la température que nous identifions avec T_C – avec une légère deviation lorsque N est petit.

5.2.2 Energie libre de torsion

Une autre quantité qui peut nous renseigner sur l'apparition de la condensation est l'*énergie libre de torsion (twist free energy)*$\Delta\mathbf{F}$, qui donne l'augmentation de l'énergie libre si on change les conditions aux limites de périodiques à anti-périodiques, les dernières imposant à la fonctions d'onde $\phi(\mathbf{x})$ la relation :

$$\phi(\mathbf{x}+\vec{L}) = -\phi(\mathbf{x}) \tag{5.46}$$

où $\vec{L}$ est un vecteur de symétrie du système (de module L) ([98]).Pour motiver cette quantité, revenons pour un instant à l'expérience des cylindres tournant de la section précédente. L'expression (5.37) de l'opérateur densité met en évidence que la fonction d'onde $\phi(\mathbf{x})$ du système en rotation est fonction propre du même hamiltonien que celle du systême au repos. En revanche, les conditions aux limites sont modifiées: une particule qui fait le tour du cylindre acquiert une phase supplémentaire, ce qui revient à changer les conditions aux limites de sorte que :

$$\phi(\vec{x}_1,\ldots,\vec{x}_i+\vec{L},\ldots,\vec{x}_N) = \exp[-i(m/\hbar)\vec{v}\cdot\vec{L}]\;\phi(\vec{x}_1,\ldots,\vec{x}_i,\ldots,\vec{x}_N) \tag{5.47}$$

Pour que le système soit normal, il faut alors que la fonction d'onde $\phi(\mathbf{r})$ permet d'inclure ces facteurs de phase sans pourtant augmenter l'énergie libre du système ([99]). Ceci est possible s'il existent des surfaces nodales dans l'espace de configuration auquelles la fonction d'onde s'annule. Par contre, une condition suffisante pour l'existence d'une structure superfluide ($\Delta F_{\vec{v}} \neq 0$) est qu'une particule peut suivre un chemin d'une position $\vec{x}_i$ à $\vec{x}_i+\vec{L}$ sur lequel la fonction d'onde ϕ reste toujours fini. Afin de distinguer entre la phase superfluide et la phase normale, il faut alors obtenir des renseignements sur la présence éventuelle de ces hypersurfaces. Dans le cadre du formalisme developpé ici, nous utilisons à ce but l'énergie libre de torsion ΔF.

Sous l'effet des conditions aux limites anti-périodiques, chaque chemin, qui se termine à une distance $\pm L$, $\pm 3L$ etc. de son point de départ, acquiert un signe moins. On peut en déduire la relation suivante entre $\Delta\mathbf{F}$ (dont chaque composante est indépendante des autres) et le nombre d'enroulement ([97]) :

$$\Delta\mathbf{F} = -\beta^{-1}\,\mathrm{Log}\left\langle \mathrm{e}^{i\mathbf{W}\pi}\right\rangle \tag{5.48}$$

Dans la phase normale chaque composante de cette quantité s'annule exponentiellement avec la taille du récipient :

$$\Delta F \sim \mathrm{e}^{-L/\xi(T)} \tag{5.49}$$

En revanche, au-dessous du point critique l'énergie libre est donnée par la fonctionnelle de Ginsburg-Pitaevskii :

$$F = \int \mathrm{d}x \left[\lambda\,|\nabla\phi(x)|^2 + \mu\,|\phi(x)|^2 + \frac{\tilde{V}_{\mathrm{int}}(0)}{2}\phi(x)^4\right] \tag{5.50}$$

à partir de laquelle, on obtient le comportement suivant pour les composantes de $\Delta\mathbf{F}$ ([87]) :[11]

$$\Delta F \sim L \tag{5.51}$$

d'où sort un deuxième critère pour la température critique :

$$\boxed{\begin{cases} \Delta F \nearrow \text{ avec la taille du système} & \text{pour } T < T_C \\ \Delta F \searrow \text{ avec la taille du système} & \text{pour } T > T_C \end{cases}} \tag{5.52}$$

Si l'on rapporte l'énergie libre de torsion en fonction de la taille du système, nous obtenons une droite horizontale pour une température égale à T_C. La figure 5.4 montre un exemple des courbes obtenues pour une densité de $na^3 = 5 \cdot 10^{-3}$.

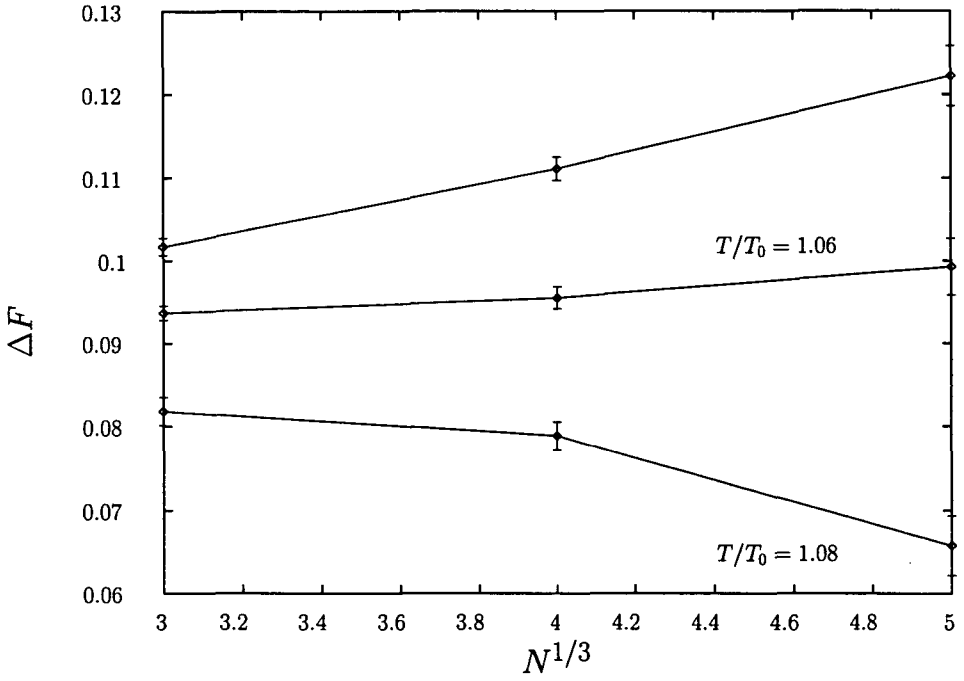


FIG. 5.4 - *Energie libre de torsion en fonction de la taille du système*

L'énergie libre de torsion ΔF (la moyenne sur les trois dimensions de l'espace) en fonction du nombre de particules N pour différentes températures T. La température critique correspond à une droite horizontale. De cette figure, obtenue pour une densité de $na^3 = 5 \cdot 10^{-3}$, nous déduisons une température critique de $T_C/T_0 \approx 1.07 \pm .01$.

5.3 Résultats

Nous appliquons ces méthodes à un système de bosons contenu à l'intérieur d'un récipient cubique de côté L avec un potentiel d'interaction de sphères dures de diamètre a

11. Cette loi s'obtient aussi par un raisonnement du type de loi d'échelle de Josephson ([98, 100])

(3.88). Nous déterminons les moyennes d'ensemble $\langle e^{iW\pi} \rangle$ et $\langle W^2 \rangle$ par le calcul numérique pour différentes tailles du système, différentes densités na^3 et températures. Pour chaque valeur de la densité nous représentons la forme invariante d'échelle à $T = T_C$ de la fraction superfluide en fonction de la température (cf. figure 5.3). Le point d'intersection des trois courbes obtenues pour $N = 27, 64$ et 125 particules nous indique la température critique (selon la relation 5.45). Sur une autre figure nous représentons l'énergie libre de torsion $\Delta \mathbf{F}$ en fonction de la taille du système $N^{1/3}$ (cf. figure 5.4) pour différentes températures T. Pour la température critique, $T = T_C$, nous nous attendons à une droite horizontale (cf. (5.52)), de sorte que les courbes $\Delta F(N^{1/3})$ ayant les pentes les plus faibles (en valeur absolue) nous fournissent des bornes sur la température critique du système. En effet, les valeurs de T_C, obtenues par les deux méthodes, sont tellement proches que nous avons seulement représenté une courbe finale $T_C/T_0(na^3)$.

Nous ont effectué cette étude sur un ordinateur CONVEX EXEMPLAR, composé d'un amas de 64 processeurs, du Centre Nationale d'Applications des Superordinateurs (NCSA) situé à l'Université d'Illinois. Le calcul d'un point d'une figure comme par exemple 5.4, correspondant à une densité, une taille du système et une température donnée, dure de 30 à 80 heures de temps de processeur.

5.3.1 Le calcul numérique

La figure 5.5 montre les valeurs de la température critique par rapport à la température de condensation d'un gaz parfait T_C/T_0 en fonction de la densité mesurée en longueurs de diffusion na^3. Nous observons une augmentation distincte dans la région dilué. Le rapport T_C/T_0 monte avec la densité depuis la valeur du gaz parfait pour atteindre son maximum proche d'une densité de $na^3 = 10^{-2}$. Cette augmentation de la température critique a également été le résultat d'un calcul récent par Bijlsma et Stoof utilisant la méthode du groupe de renormalisation ([101]).

Afin de vérifier que la version du programme que nous avons utilisée fonctionnait correctement, nous avons également effectué une étude pour des densités plus élevées. En effet, il faut vérifier que les valeurs de la température critique cessent de croître et redescendent au dessous de la valeur du gaz parfait, comme il est bien connu pour l'hélium liquide ([97]). Nos calculs ont effectivement donné ce résultat, comme le montre la figure 5.6. Les barres d'erreur sont cependant grandes, du fait que les temps de calcul n'ont pas été suffisants. Toutefois la vérification d'inversion de la variation de T_C recherchée a bien été effectuée. Nous espérons d'ailleurs poursuivre ces calculs, d'une part pour améliorer la précision sur ces point, d'autre part pour déterminer d'autres points à faible densité pour pouvoir trouver la dépendance en na^3 de la température critique et la comparer avec la prédiction théorique de Huang (5.4).

Ces études numériques ne sont évidemment pas complètement terminées. Notamment faudra-t-il encore trouver des moyens d'expliquer les résultats obtenus au niveau microscopique, par exemple en calculant le facteur de structure, un calcul qui d'ailleurs est rendu délicat par la taille finie du système.

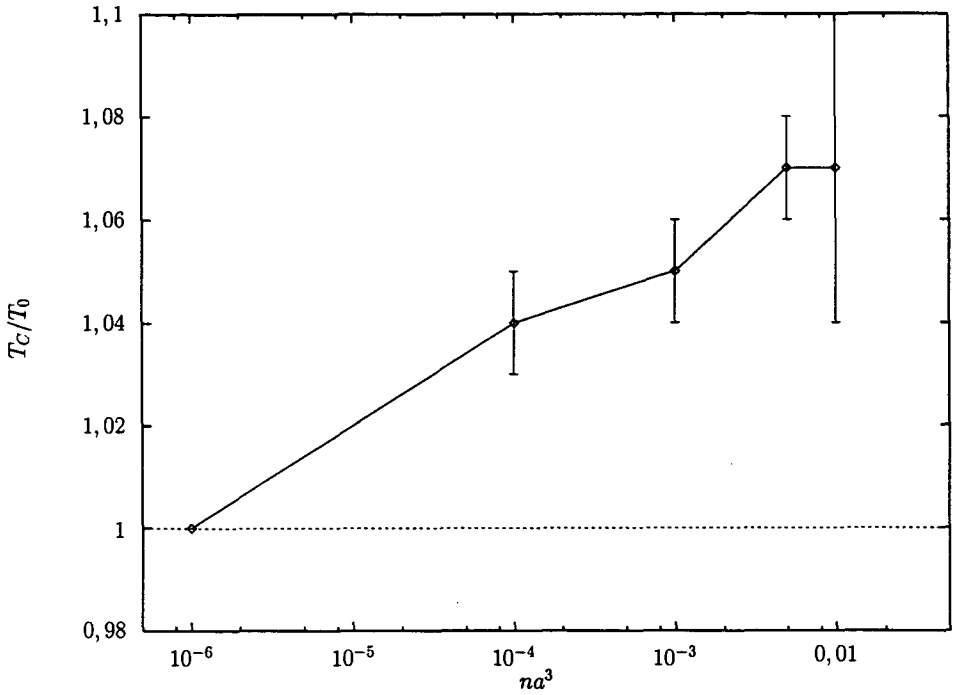


FIG. 5.5 - *Température critique en fonction de la densité*

Nous representons ici la température critique d'un gaz de bosons en interaction T_C par rapport à la température d'un gaz parfait T_0 en fonction de la densité $na^{1/3}$. Le point tout à gauche est la valeur du gaz parfait.

5.3.2 Discussion

Etant donné le caractère préliminaire de nos calculs, la discussion physique qui suit ne peut elle aussi qu'être également préliminaire.

Dans la région diluée, les interactions favorisent donc la condensation de Bose–Einstein. Une interprétation naturelle de l'augmentation de la température critique vient à l'esprit : dans un gaz parfait, les particules sont complètement indépendantes ce qui favorise l'apparition de fortes fluctuations de densité. Ainsi, la formation d'un très long cycle d'échange est elle défavorisée par le fait que le cycle peut avoir, en quelque sorte, à traverser une région de faible densité. Dès que les interactions répulsives commencent à se faire sentir, la densité du gaz devient plus homogène et ces régions de faible densité tendent à disparaître, ce qui facilite l'apparition de grands cycles d'échange et donc celle de la condensation de Bose-Einstein.

Vers une densité de $na^3 \approx 10^{-2}$, le système se soumet à un passage du régime dilué vers le régime liquide. Dans cette région de haute densité les particules sont bloquées par les cœurs dures à cause de leur distribution serrée (ils acquièrent une masse effective plus élevée que la masse nue). Ce blocage spatial rend l'échange des particules moins probable de sorte que l'importance des effets quantiques diminue. Par conséquent, il est nécessaire d'abaisser la température loin au-dessous de la valeur du gaz parfait afin de parvenir à la condensation de Bose-Einstein.

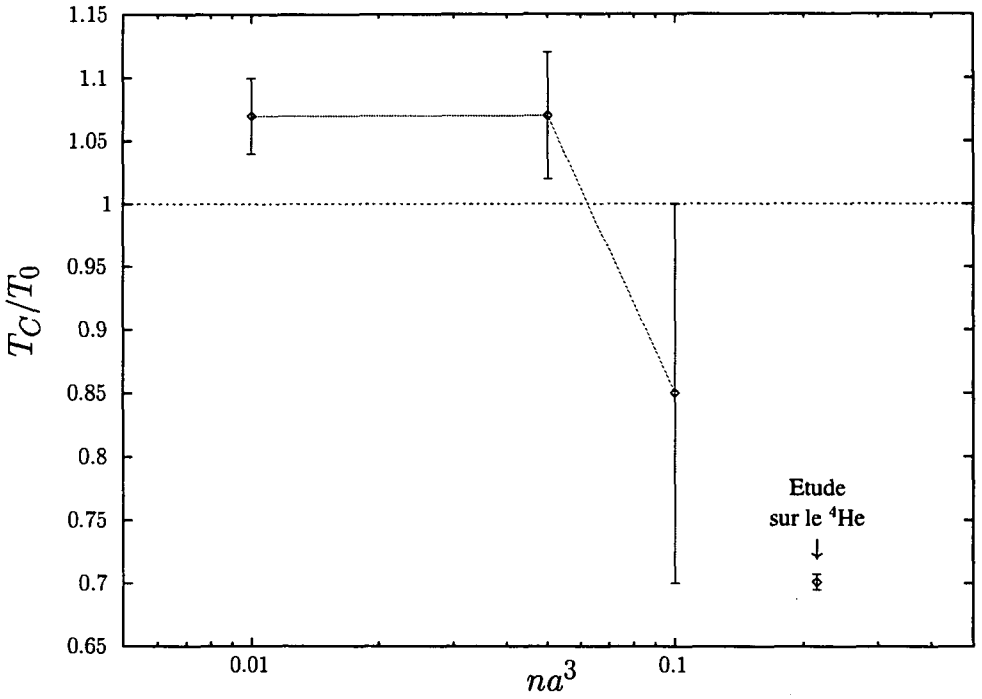


FIG. 5.6 - *Température critique à haute densité*

Cette courbe montre la continuité des valeurs obtenues à basse densité avec la valeur des études sur le helium liquide (point isolé tout à doite) et constitue ainsi une vérification de nos calculs.

Conclusion

DANS CE MÉMOIRE nous avons essayé de décrire l'idée générale et les résultats principaux d'une méthode alternative permettant de traiter les systèmes quantiques dégénérés–dilués, le formalisme des opérateurs d'Ursell. Bien qu'il existe déjà un certain nombre de traitements théoriques de ce probème, cette nouvelle façon de voir les phénomènes physiques peut, dans certains cas, présenter des avantages.

Les opérateurs d'Ursell resomment une série de diagrammes d'un développement perturbatif en puissances du potentiel pertinents pour le traitement des collisions à deux corps ou plus – dans le système auxiliaire de particules discernables. En particulier, les coefficients du viriel d'un tel système sont directement donnés par les traces des opérateurs U_q ($q \leq$ ordre du coefficient). Pour des particules discernables, il est alors clair qu'ils constituent un groupement de termes approprié. Il apparaît alors tout naturel d'appeler « effets des collisions à deux corps », à trois corps etc. les termes contenant des U_2, des U_3 etc. aussi dans le système réel de particules indiscernables. Ainsi, tous les effets des collisions à deux corps sont ceux qui nécessitent la solution du problème hamiltonien à deux corps, les effets à trois corps demandent un procédé plus compliqué et ainsi de suite. On dispose ainsi d'une nomenclature commode.

Sachant que ces opérateurs sont bien adaptés au traitement des effets hamiltoniens, la prise en compte explicite des cycles d'échange introduits par la symétrie quantique nous permet de regarder de près comment la indiscernabilité des particules affecte cet image dynamique. Partant de l'idée qu'un seul opérateur U_2 produit déjà une description presque parfaite d'un système dilué de particules discernables, il semble intéressant d'étudier la description d'un système de particules identiques au moyen d'un seul U_2. Comparé au formalisme traditionnel de fonctions d'Ursell, dans lequel on tient compte des effets de potentiel et de la nature statistique de particules au même niveau, le traitement que nous avons présenté ici permet de s'affranchir de la limitation aux bas dégrées de dégénérescence. D'ailleurs, la représentation en termes de cycles d'échange fournit une description parlant des phénomènes au voisinage du point de transition de la condensation de Bose-Einstein: le rôle de plus en plus important des longs cycles d'échange ressort d'une manière aussi expressive que dans les calculs des intégrales de chemins par exemple.

Un interêt de notre approche présente le fait qu'elle procure une vision systématique sur des phénomènes physiques variés (cependant restreinte aux systèmes dilués). Par exemple elle fournit une compréhension de l'appariement de fermions tout à fait analogue au processus de la condensation de bosons et ceci par un calcul plutôt simple. Elle ne nécessite pas l'invention, *ad hoc,* de fonctions d'onde variationnelles adéquates ou de moyennes anomales etc., mais nous donne directement l'image d'un appariement qui est essentiellement le même phénomène que la formation de molécules. D'autres canaux de condensation se laissent également facilement identifier.

A chaque étape du calcul, la méthode développée permet de déterminer des opérateurs densité réduits ce qui permet de sonder les propriétés microscopiques des systèmes macroscopiques. De cette façon les fluctuations de la fonction de corrélation binaire dans le cas de l'appariement de fermions, par exemple, sont un résultat immédiat.

Dans l'avenir, l'extension du formalisme est à prévoir afin de pouvoir étudier des systèmes dans une phase de condensation statistique, condensation de Bose–Einstein ou BCS. On peut, à ce but, introduire une définition autocohérente des opérateurs d'Ursell ce qui permet de resommer une large classe de diagrammes d'une façon analogue aux resommations en théorie de champs (équations de Dyson). Cette voie, nous l'avons commencée à explorer, sans pourtant – faute de temps – arriver à un résultat concluant. Une alternative à considérer est d'effectuer un remplaçement du type de Bogoliubov, avant de réduire les traces, pour éliminer les termes divergents.

En conclusion, le formalisme des opérateurs d'Ursell offre une vue synthétique sur un ensemble de problèmes physiques et cela en requérant des calculs souvent plus simples que beaucoup d'autres méthodes. Il peut en particulier s'avérer utile sur le plan pédagogique pour expliquer dans un même cadre des phénomènes divers. Surtout nous espérons qu'il fournit un point de départ commode vers des développements nouveaux.

Annexe A. Lien avec la théorie de Hartree-Fock [1]

Nous voudrons mettre en œuvre dans cet appendice un premier formalisme variationnel afin d'établir un lien entre la théorie de Hartree-Fock et les opérateurs d'Ursell. Les méthodes variationnelles peuvent devenir utiles dans le cas des systèmes moins dilués, où il est possible qu'elles permettent de tenir compte d'un grand nombre de diagrammes sans qu'un calcul explicite en soit nécessaire.

La première étape est d'établir un schéma variationnel dans l'ensemble grand-canonique. Nous suivons le *principe du maximum de l'entropie statistique* : l'opérateur densité optimale parmi les opérateurs obéissant à des contraintes extérieures (valeurs moyennes données pour l'énergie et le nombre de particules dans l'ensemble grand-canonique, par exemple) rend l'entropie statistique maximale pour l'état d'équilibre [102: 4.1.3]. Dans notre cas (ensemble grand-canonique) cela revient à dire que la quantité suivante, appelée grand potentiel d'essai, atteint un minimum par rapport à des variations de l'opérateur densité d'essai ρ^{essai} dans l'équilibre thermodynamique :

$$\Lambda = \text{Trace}^{S,A}\left\{\rho^{\text{essai}}\left(\mathfrak{H} + k_B T \,\text{Log}\,\rho^{\text{essai}} - \mu N\right)\right\} \tag{A.1}$$

Ici, la trace porte sur le nombre de particules N et leurs états (correctement symétrisés), et μ est un multiplicateur de Lagrange.

A titre d'exemple, calculons la solution exacte: La variation $\delta\rho^{\text{essai}}$ suscite un changement de Λ donné par :

$$\delta\Lambda = \text{Trace}^{S,A}\left\{\delta\rho^{\text{essai}}\left(\mathfrak{H} + k_B T \,\text{Log}\,\rho^{\text{essai}} + k_B T - \mu N\right)\right\} \tag{A.2}$$

Nous imposons que l'opérateur densité soit normalisé à 1 :

$$\text{Trace}^{S,A}\left\{\rho^{\text{essai}}\right\} = 1 \tag{A.3}$$

Un extremum de Λ est alors obtenu si la relation suivante, faisant intervenir un deuxième multiplicateur de Lagrange λ, est vraie :

$$\delta\Lambda + \lambda \text{Trace}^{S,A}\left\{\delta\rho^{\text{essai}}\right\} = 0 \tag{A.4}$$

Cette relation est satisfaite pour un opérateur densité donné par :

$$\rho^{\text{essai}} = \frac{\exp\left[-\beta\left(\mathfrak{H} - \mu N\right)\right]}{\mathcal{Z}_{\text{gc}}^{\text{essai}}} \stackrel{\text{def}}{=} \rho_{\text{gc}} \tag{A.5}$$

1. Ce travail était réalisé pendant un agréable séjour à l'Université de Massachusetts et en collaboration avec Prof. William Mullin.

avec $\mathcal{Z}_{gc}^{essai}$ défini par :

$$\mathcal{Z}_{gc}^{essai} = \text{Trace}^{S,A}\left\{\exp\left[-\beta\left(\mathfrak{H} - \mu N\right)\right]\right\} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{Z}_{gc} \tag{A.6}$$

Nous retrouvons bien les expressions Boltzmann-Gibbs de l'opérateur densité et de la fonction de partition de l'ensemble grand-canonique. Nous pouvons alors dire que l'opérateur densité optimale d'une classe d'opérateurs donnée rend $\Lambda(\rho^{essai})$ stationnaire, ce qui permet l'application des méthodes variationnelles [102: 4.2.2][2]

Définissons maintenant un opérateur d'essai d'une manière analogue à l'opérateur exact, en remplaçant le vrai hamiltonien $\mathfrak{H}$ par un hamiltonien d'essai H :

$$\rho^{essai} = \exp\left[-\beta\left(H - \mu N\right)\right] \tag{A.7}$$

En remplaçant ρ^{essai} par cette forme dans (A.1), nous obtenons :

$$\Lambda = \text{Trace}^{S,A}\left\{\rho^{essai}\left(\mathfrak{H} - H\right)\right\} - k_B T \,\text{Log}\left[\text{Trace}\left\{e^{\beta(\mu N - H)}\begin{matrix}S\\A\end{matrix}\right\}\right] \tag{A.8}$$

Pour $H = \mathfrak{H}$ nous retrouvons immédiatement le bon résultat. Afin de pouvoir utiliser le développement en opérateurs d'Ursell, nous exprimons Λ selon :

$$\Lambda = \left.\frac{\partial}{\partial\alpha}\right|_{\alpha=0} \text{Log}\left[\text{Trace}\left\{e^{\beta(\mu N - H)}e^{\alpha(\mathfrak{H}-H)}\begin{matrix}S\\A\end{matrix}\right\}\right] - k_B T \,\text{Log}\left[\text{Trace}\left\{e^{\beta(\mu N - H)}\begin{matrix}S\\A\end{matrix}\right\}\right] \tag{A.9}$$

Les traces de cette équation portent sur les états des particules discernables de sorte que les opérateurs de symétrisation S/A apparaissent de façon explicite. Pour simplifier, nous introduisent la définition $\mathcal{Z}_{gc}^{(\alpha)}$ pour l'argument du premier logarithme de (A.9) et $\mathcal{Z}_{gc}^{(0)}$ pour celui du deuxième.

Pour faire le lien avec les théories du champ moyen, nous supposons que l'hamiltonien H est la somme d'hamiltoniens à un corps, les particules se déplaçant dans un potentiel effectif $V_{ch.moy.}$ crée par les interactions :

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left(T(i) + V_{ch.moy.}(i)\right) \tag{A.10}$$

(T désigne l'opérateur d'énergie cinétique à une particule). Comme H ne contient que des termes à un corps, il est immédiat de démontrer que le développement d'Ursell donne le résultat suivant (de façon exacte) :

$$\text{Log}\left[\mathcal{Z}_{gc}^{(0)}\right] = -\eta \text{Trace}_1\left\{\text{Log}\left\{1 - \eta z U_1^{(0)}\right\}\right\} \tag{A.11}$$

2. Dans cette reférence se trouve également une démonstration du fait que ρ_{gc} rend en effet Λ minimale et pas seulement stationnaire.

où nous utilisons l'opérateur $U_1^{(0)}$ associé à l'hamiltonien d'essai à un corps et défini par :

$$U_1^{(0)} = \mathrm{e}^{-\beta\left(T+V_{\text{ch.moy.}}\right)} \tag{A.12}$$

Pour le développement du terme à plusieurs corps $\mathrm{e}^{\alpha(\mathfrak{H}-H)}$, nous retenons les termes jusqu'au premier ordre en U_2 :

$$\begin{aligned}\mathrm{Log}\left[\mathcal{Z}_{\text{gc}}^{(\alpha)}\right] &= -\eta\mathrm{Trace}_1\left\{\mathrm{Log}\left[1-\eta z U_1^{(\alpha)}\right]\right\} \\ &\quad + \mathrm{Trace}_{1,2}\left\{z^2 U_2^{(\alpha)}(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2}\left[1+\eta f^{(\alpha)}(1)\right]\left[1+\eta f^{(\alpha)}(2)\right]\right\}\end{aligned} \tag{A.13}$$

Dans cette expression nous faisons usage des opérateurs variationnels suivants :[3]

$$U_1^{(\alpha)}(1) = \mathrm{e}^{\beta\left(T(1)+V_{\text{ch.moy.}}(1)\right)}\,\mathrm{e}^{-\alpha V_{\text{ch.moy.}}(1)} = U_1^{(0)}(1)\,\mathrm{e}^{-\alpha V_{\text{ch.moy.}}(1)} \tag{A.14}$$

$$f^{(\alpha)}(1) = zU_1^{(\alpha)}(1)/\left[1-\eta z U_1^{(\alpha)}(1)\right] \tag{A.15}$$

$$U_2^{(\alpha)}(1,2) = U_1^{(0)}(1)U_1^{(0)}(2)\left[\mathrm{e}^{\alpha\left[V_{\text{int}}(1,2)-V_{\text{ch.moy.}}(1)-V_{\text{ch.moy.}}(2)\right]} - \mathrm{e}^{-\alpha\left[V_{\text{ch.moy.}}(1)+V_{\text{ch.moy.}}(2)\right]}\right] \tag{A.16}$$

Nous développons (A.13) en α et dérivons selon (A.9) :

$$\begin{aligned}&\left.\frac{\partial}{\partial\alpha}\right|_{\alpha=0}\mathrm{Log}\left[\mathcal{Z}_{\text{gc}}^{(\alpha)}\right] \\ &\quad = -\mathrm{Trace}_1\left\{f^{(0)}\,V_{\text{ch.moy.}}\right\} + \mathrm{Trace}\left\{V_{\text{int}}(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2}f^{(0)}(1)f^{(0)}(2)\right\}\end{aligned} \tag{A.17}$$

La prochaine étape consiste dans la variation du potentiel à un corps $V_{\text{ch.moy.}}$ de l'opérateur densité d'essai. Après un calcul court on obtient :

$$\delta\,\mathrm{Log}\left[\mathcal{Z}_{\text{gc}}^{(0)}\right] = -\beta\mathrm{Trace}_1\left\{f^{(0)}\delta V_{\text{ch.moy.}}\right\} \tag{A.18}$$

$$\begin{aligned}\delta\left.\frac{\partial}{\partial\alpha}\right|_{\alpha=0}\mathrm{Log}\left[\mathcal{Z}_{\text{gc}}^{(\alpha)}\right] &= -\mathrm{Trace}_1\left\{f^{(0)}\,\delta V_{\text{ch.moy.}}\right\} - \mathrm{Trace}_1\left\{\delta f^{(0)}V_{\text{ch.moy.}}\right\} \\ &\quad + \mathrm{Trace}_{1,2}\left\{V_{\text{int}}(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2}\left[\delta f^{(0)}(1)f^{(0)}(2) + f^{(0)}(1)\delta f^{(0)}(2)\right]\right\}\end{aligned} \tag{A.19}$$

En imposant que la variation $\delta\Lambda$ s'annule en premier ordre, nous obtenons la condition :

$$\mathrm{Trace}_1\left\{\delta f^{(0)}V_{\text{ch.moy.}}\right\} = 2\,\mathrm{Trace}_{1,2}\left\{V_{\text{int}}(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2}\delta f^{(0)}(1)f^{(0)}(2)\right\} \tag{A.20}$$

3. Dans le terme $\exp\left[\alpha\left(\mathfrak{H}-H\right)\right]$ l'énergie cinétique est éliminée de sorte qu'elle n'apparait que dans les termes à un corps ($U_1^{(0)}$).

de sorte que le potentiel à un corps le plus adapté est donné par l'équation implicite suivante ($f^{(0)}$ dépend de $V_{\text{ch.moy.}}$) :

$$\boxed{V_{\text{ch.moy.}} = 2\,\text{Trace}_2\left\{V_{\text{int}}(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2}f^{(0)}(2)\right\}} \tag{A.21}$$

On reconnaît dans ce résultat l'équation de Hartree-Fock à température finie. Le potentiel $V_{\text{ch.moy.}}$ n'est pas nécessairement diagonal dans la représentation position. Le grand potentiel d'essai Λ s'écrit (équations (A.11) et (A.17)) :

$$\begin{aligned}\Lambda = -k_B T\eta\text{Trace}_1\left\{\text{Log}\{1-\eta z U_1^{(0)}\right\} \\ - \text{Trace}_{1,2}\left\{V_{\text{int}}(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2}f^{(0)}(1)f^{(0)}(2)\right\}\end{aligned} \tag{A.22}$$

L'énergie interne peut également être évaluée:

$$\begin{aligned}E &= \text{Trace}_1\left\{(T+V_{\text{ch.moy.}})\,f^{(0)}\right\} - \text{Trace}_{1,2}\left\{V_{\text{int}}(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2}f^{(0)}(1)f^{(0)}(2)\right\} \\ &= \text{Trace}_1\left\{T f^{(0)}\right\} + \text{Trace}_{1,2}\left\{V_{\text{int}}(1,2)\frac{1+\eta P_{\text{ex}}}{2}f^{(0)}(1)f^{(0)}(2)\right\}\end{aligned} \tag{A.23}$$

Nous obtenons les résultats connus de l'approximation de Hartree-Fock dans le cas de température non-nulle ([26: §28]). Faute de temps nous n'avons pas poursuivi la recherche d'un principe variationnel allant au-delà de la théorie de Hartree-Fock, mais nous espérons que cette voie peut servir pour des applications futures.

Annexe B. Approche de théorie de champs (Beliaev)

Cet annexe rapporte essentiellement le travail de Beliaev ([21, 22]), principalement les sections 11,18-22 de [26]. Beliaev applique la théorie de champs, développée initialement pour l'électrodynamique quantique, au problème à N corps à température nulle, et obtient des quantités thermodynamiques pour un gaz de bosons interagissant par un potentiel de sphères dures. Pour pouvoir traiter ce potentiel fortement singulier, il est nécessaire de sommer toute une classe de diagrammes de perturbation en potentiel V_{int}, celle des *diagrammes en échelle*, afin d'exprimer les quantités physiques en fonction de termes réguliers.

B.1 Fonctions de Green pour des bosons

Dans le cas d'un gaz parfait de N bosons à température nulle, contenu dans un volume $\mathcal{V}$, toutes les particules se trouvent dans un même état, disons, pour fixer les idées, dans l'état d'impulsion $\mathbf{k}$ nulle. L'état fondamental $|g(N)\rangle$ est alors donné dans l'espace de Fock par :

$$|\mathrm{g}(N)\rangle = |N, 0, 0, \ldots\rangle \tag{B.1}$$

Les opérateurs destruction et création a_0 et $a_0^\dagger$, agissant sur l'état à $\mathbf{k} = 0$, n'annihilent pas l'état fondamental. Par conséquent, le procédé habituel dans le cas de fermions – de réduire des produits temporels (*T-produits*), apparaissant par exemple dans les fonctions de Green, aux contractions en utilisant le théorème de Wick – n'est plus applicable : un nombre trop important de contractions ne s'annule plus et il faudrait tenir compte d'un très grand nombre de termes.

Deux méthodes ont été développées pour permettre néanmoins d'appliquer ces simplifications. La première ramène le problème à un système fictif de fermions dont la dégénéréscence de spin fictif (égale au nombre de particules N) engendre les proprietés cherchées pour l'état à impulsion nulle ([103: 3.1] et références y incluses). La deuxième, uniquement valable dans la limite thermodynamique, remplace les opérateur destruction et création de l'état $k = 0$ par des nombres complexes (*remplacement de Bogoliubov*). C'est cette méthode que nous décrivons dans la suite.

Soit n_0 ($n_0 \approx N/\mathcal{V} = n$) la valeur moyenne du nombre d'occupation de l'état $\mathbf{k} = 0$ dans l'état fondamental des particules en interaction $|\Psi_o\rangle$:

$$n_0 = \frac{1}{\mathcal{V}} \left\langle \Psi_0 \mid a_0^\dagger a_0 \mid \Psi_0 \right\rangle \tag{B.2}$$

Nous retirons la partie contrariante de l'opérateur de champ $\hat{\psi}(\vec{x})$,

$$\hat{\psi}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} a_{\vec{k}} \tag{B.3}$$

en la remplaçant par un nombre complexe, égal à $\sqrt{n_0}$; l'autre partie, comprenant les opérateurs destruction agissant sur des états à impulsion non-nulle, n'est pas affectée :

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\vec{x}) &\to \sqrt{n_0} + \hat{\varphi}(\vec{x}) \\ &= \sqrt{n_0} + {\sum_{\vec{k}}}' \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} a_{\vec{k}}\end{aligned} \tag{B.4}$$

La somme ne porte que sur les impulsions non-nulles. Ce remplacement est valide dès que le commutateur de a_0 et $a_0^\dagger$ devient négligeable devant leur produit :

$$\left[a_0, a_0^\dagger\right] |\Phi_0(n_0)\rangle = 1\,|\Phi_0(n_0)\rangle \ll a_0^\dagger a_0\,|\Phi_0(n_0)\rangle = n_0 \mathcal{V}\,|\Phi_0(n_0)\rangle \tag{B.5}$$

ce qui se produit en effet dans la limite thermodynamique ($n_0 = \text{const}, \mathcal{V} \to \infty$). L'hamiltonien, composé d'un opérateur d'énergie cinétique $\hat{T}$ et d'énergie potentielle $\hat{V}$, est remplaçe par un hamiltonien de Bogoliubov :

$$\mathfrak{H} = \hat{T} + \hat{V} \to \mathfrak{H}_{\text{Bog}} = \hat{T} + \hat{V}_{\text{Bog}} \tag{B.6}$$

dont la partie d'énergie cinétique reste inchangée comme les particules du condensat n'y contribuent pas. Les termes de l'énergie potentielle peuvent maintenant être classés en ordre décroissant de n_0 :

$$\begin{aligned}\hat{V} &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{\psi}^\dagger(\vec{x})\hat{\psi}^\dagger(\vec{x}')V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}')\hat{\psi}(\vec{x}')\hat{\psi}(\vec{x}) \\ &\to \hat{V}_{\text{Bog}} = \hat{V}_0 + \hat{V}_{1a} + \hat{V}_{1b} + \hat{V}_{1c} + \hat{V}_{1d} + \hat{V}_{2a} + \hat{V}_{2b} + \hat{V}_3\end{aligned} \tag{B.7}$$

avec :

$$\hat{V}_0 = \frac{1}{2}n_0^2 \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}') \tag{B.8}$$

$$\hat{V}_{1a} = \frac{1}{2}n_0 \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}) \tag{B.9}$$

$$\hat{V}_{1b} = \frac{1}{2}n_0 \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x})\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x}')V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}') \tag{B.10}$$

$$\hat{V}_{1c} = n_0 \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x}')V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}) \tag{B.11}$$

$$\hat{V}_{1d} = n_0 \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x})V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}) \tag{B.12}$$

$$\hat{V}_{2a} = n_0^{1/2} \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x})\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x}')V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}) \tag{B.13}$$

$$\hat{V}_{2b} = n_0^{1/2} \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x})V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}) \tag{B.14}$$

$$\hat{V}_3 = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x})\hat{\varphi}^\dagger(\vec{x}')V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}')\hat{\varphi}(\vec{x}) \tag{B.15}$$

Le premier opérateur, $\hat{V}_0$, se réduit à un nombre E_0 :[1]

$$\hat{V}_0 = \frac{1}{2}n_0^2 \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,V_{\text{int}}(\vec{x}-\vec{x}') = \frac{1}{2}n_0^2 \mathcal{V} \tilde{V}_{\text{int}}(0) = E_0(n_0) \tag{B.16}$$

1. $\tilde{V}_{\text{int}}(\vec{k})$ est la transformée de Fourier du potentiel d'interaction $V_{\text{int}}(\vec{x})$

Dans un gaz de particules sans interaction, l'état fondamental est donné par $|g(N)\rangle$. Comme l'application d'un opérateur de destruction $a_{\vec{k}}$; $\left|\vec{k}\right| \neq 0$ annihile cet état, nous l'identifions avec le *vide*. Chaque opérateur d'énergie potentielle, à part $\hat{V}_0$, contient au moins un opérateur $a_{\vec{k}}$ de sorte que la valeur moyenne de l'hamiltonien dans ce vide est donné par (B.16) :

$$\langle g(N) \mid \mathfrak{H}_{\text{Bog}} \mid g(N)\rangle = \frac{1}{2} n^2 \mathcal{V} \tilde{V}_{\text{int}}(0) = E_0(n_0 = n) \tag{B.17}$$

ce qui nous donne la correction de premier ordre de l'énergie de l'état fondamental pour un gaz de particules en interaction.

Par la substitution des opérateurs a_0 nous négligeons les fluctuations du nombre d'occupation du condensat, ce qui entraîne que le nombre total de particules n'est plus conservé : l'opérateur du nombre de particules $\hat{N}$, donné par :

$$\frac{\hat{N}}{\mathcal{V}} = \frac{N_0}{\mathcal{V}} + \sum_{\vec{k}}{}' \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} \tag{B.18}$$

$$= n_0 + \frac{\hat{N}'}{\mathcal{V}} \tag{B.19}$$

ne commute plus avec l'hamiltonien, qui contient des termes modifiant le nombre de particules hors du condensat. Nous introduisons alors un multiplicateur de Lagrange μ, qui nous permettra de reformuler la condition suivante :

$$\left\langle \hat{N} \right\rangle = N \tag{B.20}$$

Nous ajoutons un terme à l'hamiltonien :

$$\hat{K}_{\text{Bog}} = \mathfrak{H}_{\text{Bog}} - \mu \hat{N} \tag{B.21}$$

dont l'état fondamental $|\Phi_0(\mu)\rangle$ va maintenant être caracterisé par μ, le nombre de particules n'étant plus specifié. La condition (B.20) devient :

$$\left[-\frac{\partial \Omega(T, V, \mu)}{\partial \mu}\right] = -\frac{\partial}{\partial \mu} \left\langle \Phi_0(\mu) \mid \hat{K}_{\text{Bog}} \mid \Phi_0(\mu) \right\rangle = \left\langle \Phi_0(\mu) \mid \hat{N} \mid \Phi_0(\mu) \right\rangle = N \tag{B.22}$$

D'ailleurs, à cause du remplacement de Bogoliubov de a_0 par un nombre, nos expressions contiennent maintenant un nouveau paramètre, le nombre de particules dans le condensat, N_0. Ce paramètre sera déterminé de manière implicite en se servant du fait que le potentiel thermodynamique est stationnaire par rapport au variations de N_0 à l'équilibre :

$$\left[\frac{\partial \Omega(T, V, \mu, N_0)}{\partial N_0}\right] = 0 \tag{B.23}$$

A partir de cette expression, nous sommes en mesure de calculer le potentiel chimique :

$$\left(\frac{\partial\Omega}{\partial N_0}\right) = \left\langle \mathbf{O} \mid \frac{\partial \hat{K}_{\text{Bog}}}{\partial N_0} \mid \mathbf{O} \right\rangle = \left\langle \mathbf{O} \mid \frac{\partial \hat{V}_{\text{Bog}}}{\partial N_o} - \mu \mid \mathbf{O} \right\rangle = 0 \tag{B.24}$$

d'où :

$$\mu = \left\langle \mathbf{O} \mid \frac{\partial \hat{V}_{\text{Bog}}}{\partial N_0} \mid \mathbf{O} \right\rangle \tag{B.25}$$

Nous nous plaçons maintenant dans la représentation de Heisenberg d'un opérateur noté $\mathcal{O}_S$ dans la représentation de Schrödinger, le rôle de l'hamiltonien étant rempli par l'approximation de Bogoliubov de $\hat{K}$, $\hat{K}_{\text{Bog}}$:

$$\mathcal{O}_K(t) = \mathrm{e}^{i\hat{K}_{\text{Bog}}t/\hbar}\mathcal{O}_S\mathrm{e}^{-i\hat{K}_{\text{Bog}}t/\hbar} \tag{B.26}$$

La partie correspondant aux particules du condensat de l'opérateur de champs $\hat{\psi}$ n'en est pas affectée :

$$\hat{\psi}_K(x) = n_0^{1/2} + \mathrm{e}^{iK_{\text{Bog}}x_0/\hbar}\,\hat{\varphi}(\vec{x})\,\mathrm{e}^{-iK_{\text{Bog}}x_0/\hbar}; \quad x = (\vec{x}, x_0) \tag{B.27}$$

Faisant usage du produit temporel T de deux opérateurs $\mathcal{O}$ et $\mathcal{O}'$:

$$T[\mathcal{O}(\vec{x}_1,t_1)\mathcal{O}'(\vec{x}_2,t_2)] = \begin{cases} \mathcal{O}(\vec{x}_1,t_1)\mathcal{O}'(\vec{x}_2,t_2) & \text{pour } t_1 \geq t_2 \\ \mathcal{O}'(\vec{x}_2,t_2)\mathcal{O}(\vec{x}_1,t_1) & \text{pour } t_1 < t_2 \end{cases} \tag{B.28}$$

nous definissons la fonction de Green $G(x,y)$:

$$\begin{aligned} iG(x,y) &= \left\langle \mathbf{O} \mid T\left[\hat{\psi}_K(x)\hat{\psi}_K^\dagger(y)\right] \mid \mathbf{O} \right\rangle \\ &= n_0 + n_0^{1/2}\left\langle \mathbf{O} \mid \hat{\varphi}_K(x) + \hat{\varphi}_K^\dagger(y) \mid \mathbf{O} \right\rangle + \left\langle \mathbf{O} \mid T\left[\hat{\varphi}_K(x)\hat{\varphi}_K^\dagger(y)\right] \mid \mathbf{O} \right\rangle \end{aligned} \tag{B.29}$$

où $|\mathbf{O}\rangle$ est la fonction d'onde de l'état fondamental de $\hat{K}_{\text{Bog}}$ normalisée à 1. A cause de l'invariance par translation (conservation de l'impulsion), le deuxième terme de l'expression précédente s'annule. Nous écrivons alors G' la partie de la fonction de Green à déterminer :

$$iG'(x,y) = \left\langle \mathbf{O} \mid T\left[\hat{\varphi}_K(x)\hat{\varphi}_K^\dagger(y)\right] \mid \mathbf{O} \right\rangle \tag{B.30}$$

B.2 Règles de Feynman et fonctions de Green

Dans cette section nous établissons les règles de Feynman utiles pour la détermination de la fonction de Green de bosons $G'(x,y)$. Nous changeons de nouveau de représentation, cette fois-ci nous exprimons les opérateurs en représentation d'interaction.

Nous définissons alors une partie, $\hat{K}_1$, de $\hat{K}_{\text{Bog}}$ regroupant les termes d'interaction et une autre corrspondant au reste, dont entre autre l'énergie cinétique $\hat{T}$:

$$\begin{aligned}\hat{K}_0 &= E_0(n_0) - \mu N_0 + \hat{T} - \mu \hat{N}' \\ \hat{K}_1 &= \hat{K}_{\text{Bog}} - \hat{K}_0 \\ &= \hat{V}_{1a} + \hat{V}_{1b} + \hat{V}_{1c} + \hat{V}_{1d} + \hat{V}_{2a} + \hat{V}_{2b} + \hat{V}_3\end{aligned} \tag{B.31}$$

Les opérateurs dans la représentation d'interaction sont alors donnés par :

$$\mathcal{O}_I(t) = \mathrm{e}^{i\hat{K}_0 t/\hbar}\mathcal{O}_S\mathrm{e}^{-i\hat{K}_0 t/\hbar} \tag{B.32}$$

Comme $\hat{N}$ commute avec $\hat{K}_0$, l'état fondamental $|0\rangle$ de $\hat{K}_0$ est un état avec un nombre defini de particules. En effet, il s'agit de l'état $|g(N)\rangle$, l'état fondamental d'un système de bosons sans interaction. Le théoreme de Gell-Mann et Low nous donne alors le développement suivant pour G' :

$$\begin{aligned}iG'(x,y) = \sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_m \\ \times\left\langle 0 \mid T\left[\hat{K}_1(t_1)\ldots\hat{K}_1(t_m)\hat{\varphi}_I(x)\hat{\varphi}_I^\dagger(y)\right] \mid 0\right\rangle_{\text{connectés}}\end{aligned} \tag{B.33}$$

à l'ordre zéro nous trouvons la fonction de Green G^0 d'un gaz de bosons libres :

$$iG'(x,y)|_{\text{ordre 0}} = \left\langle 0 \mid T\left[\hat{\varphi}_I(x)\hat{\varphi}_I^\dagger(y)\right] \mid 0\right\rangle_{\text{connectés}} = iG^0(x,y) \tag{B.34}$$

Dans un système isotrope la transformée de Fourier est donnée par :

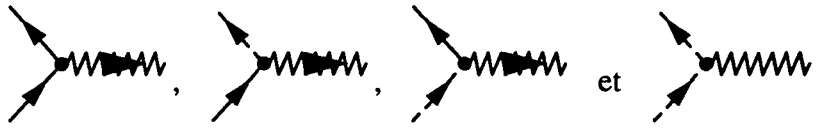
$$G^0(q) = \left[q_0 - \omega_{\vec{q}} + \mu\hbar^{-1} + i\eta\right]^{-1} \tag{B.35}$$

où $\hbar\omega_{\vec{q}} = \hbar^2\vec{q}^2/2m$ donne l'énergie cinétique d'une particule.

A partir de (B.33) nous déduisons les règles de Feynman suivantes :

1. Chaque flèche pointilée, correspondant à une particule du condensat, allant vers ou partant d'un vertex contribue un facteur $n_0^{1/2}$
2. Comme $\hat{V}_{1a}$, $\hat{V}_{1b}$ et $\hat{V}_3$ sont symétriques sous l'échange $x \leftrightarrow x'$ chaque fois que l'un de ces opérateur apparait dans un diagramme, il existe un autre diagramme avec la même contribution obtenu par cet échange. Ceci compense les facteurs $1/2$ qui apparaissent dans (B.9), (B.10) et (B.15), de sorte que chaque diagramme de Feynman a le même facteur de comptage, 1.
3. Chaque diagramme de l'ordre m de $G'(p)$ a un facteur $(i/\hbar)^m(-i)^C(2\pi)^{4(C-m)}$, où C est le nombre de facteurs n_0 du diagramme
4. Il n'y a pas de diagramme où G^0 se referme sur elle-même ou où les bouts de G^0 sont liés par la même interaction
5. Il faut intégrer sur toutes les impulsion intermédiaires

Les quatre vertex possibles sont :



(B.36)

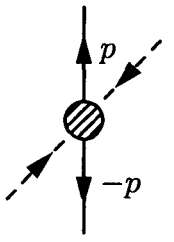
Ici, une flèche pointillée correspond à une particule du condensat et la flèche en trait plein note la propagation d'une particule non-condensée. Dans le cas du dernier vertex, où la particule, originaire du condensat, reste dans le condensat, l'interaction ne peut transmettre d'impulsion.

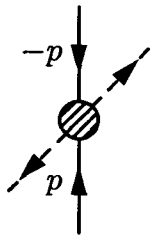
À cause de la non-conservation du nombre de particules, les lignes de particules d'un diagramme peuvent être interrompues. Il est quand même possible de définir des *énergies propres* afin de analyser le problème à l'aide des équation de Dyson. La première énergie propre, $\Sigma^{\star}_{11}(p)$, correspond à des diagrammes irréductibles avec une ligne de particule non-condensée entrante et une ligne sortante :

$\Sigma^{\star}_{11}(p) =$ 

(B.37)

Les deux autres formes de l'énergie propre correspondent à l'« excitation » de deux particules du condensat ($\Sigma^{\star}_{02}(p)$ – aucune ligne entrante, deux lignes sortantes) respectivement à la « desexcitation » de deux particules à impulsion non-nulle vers le condensat ($\Sigma^{\star}_{20}(p)$) :

$\Sigma^{\star}_{02}(p) =$ 

$\Sigma^{\star}_{20}(p) =$ 

(B.38)

De façon analogue nous sommes ammenés à introduire, à part de la fonction $G'(p)$, symbolisée par une flèche en trait épais :

$$G'(p) = \Big\uparrow p \quad \Leftrightarrow \quad iG'(x,y) = \left\langle \mathbf{O} \mid T\left[\hat{\varphi}_K(x)\hat{\varphi}^{\dagger}_K(y)\right] \mid \mathbf{O}\right\rangle \tag{B.39}$$

des *fonctions de Green anomales* qui rendent compte de la non-conservation du nombre de particules :

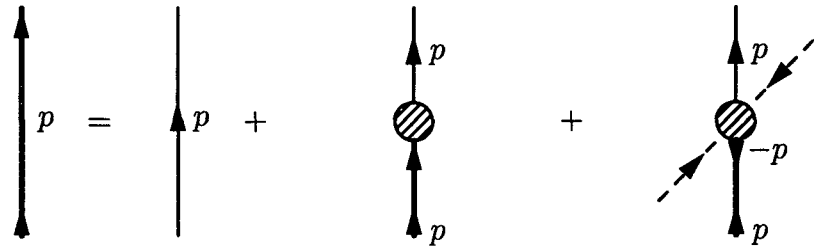
$$G'_{02}(p) = \begin{array}{c} p \\ \Big\updownarrow \\ -p \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad iG'_{02}(x,y) = \langle \mathbf{O} \mid T\left[\hat{\varphi}_K(x)\hat{\varphi}_K(y)\right] \mid \mathbf{O}\rangle \tag{B.40}$$

et :

$$G'_{20}(p) = \quad \overset{-p}{\underset{p}{\Big\uparrow}} \quad \Leftrightarrow \quad iG'_{20}(x,y) = \left\langle \mathbf{O} \mid T\left[\hat{\varphi}^{\dagger}_K(x)\hat{\varphi}^{\dagger}_K(y)\right] \mid \mathbf{O} \right\rangle \tag{B.41}$$

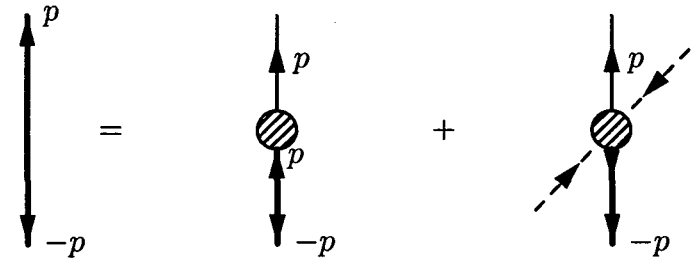
La forme des transformées de Fourier des fonction de Green anomales montre explicitement que l'état fondamental de l'opérateur $\hat{K}_{\text{Bog}}$, $|\mathbf{O}\rangle$, n'est pas état propre de $\hat{N}$.

Beliaev a obtenue les équations de Dyson suivantes :

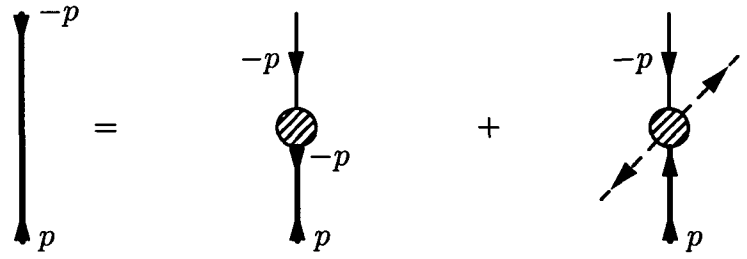


$$G'(p) = G^0(p) + G^0(p)\Sigma^{\star}_{11}(p)G'(p) + G^0(p)\Sigma^{\star}_{02}(p)G'_{20}(p) \tag{B.42}$$

Comme les fonctions de Green anomales s'annulent à l'ordre zéro, les équations pour ces fonctions sont simplement données par :



$$G'_{02}(p) = G^0(p)\Sigma^{\star}_{11}(p)G'_{02}(p) + G^0(p)\Sigma^{\star}_{02}(p)G'(-p) \tag{B.43}$$



$$G'_{20}(p) = G^0(-p)\Sigma^{\star}_{11}(-p)G'_{20}(p) + G^0(-p)\Sigma^{\star}_{20}(-p)G'(p) \tag{B.44}$$

Nous resolvons (B.44) en fonction de G' :

$$G'_{20}(p) = \left[[G^0(-p)]^{-1} - \Sigma^{\star}_{11}(-p)\right]^{-1} \Sigma^{\star}_{20}(-p)G'(p) \tag{B.45}$$

Injectant cette solution dans (B.42), nous obtenons la solution formelle suivante de la fonction de Green des particules hors condensat :

$$G'(p) = \left[[G^0(p)]^{-1} - \Sigma^\star_{11}(p) - \Sigma^\star_{02}(p) \left[[G^0(-p)]^{-1} - \Sigma^\star_{11}(-p) \right]^{-1} \Sigma^\star_{20}(-p) \right]^{-1} \quad \text{(B.46)}$$

La fonction de Green d'ordre zéro est donnée par (B.35). En introduisant les parties symétriques et antisymétriques de l'énergie propre $\Sigma^\star_{11}$:

$$S(p) = \frac{1}{2}\left[\Sigma^\star_{11}(p) + \Sigma^\star_{11}(-p)\right] \quad \text{et} \quad A(p) = \frac{1}{2}\left[\Sigma^\star_{11}(p) - \Sigma^\star_{11}(-p)\right] \quad \text{(B.47)}$$

on obtient :

$$G'(p) = \frac{p_0 + \omega_{\vec{p}} - \mu\hbar^{-1} + S(p) - A(p)}{[p_0 - A(p)]^2 - [\omega_{\vec{p}} - \mu\hbar^{-1} + S(p)]^2 + \Sigma^\star_{20}(p)\Sigma^\star_{02}(p)} \quad \text{(B.48)}$$

B.3 Potentiel effectif

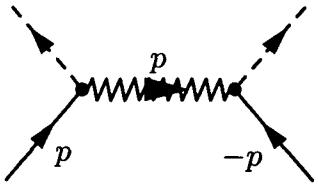
Dans cette section nous montrons quels diagrammes il faut resommer pour obtenir une bonne approximation des quantités thermodynamiques pour un potentiel fortement repulsif. Afin de simplifier la discussion nous nous limitons à la détermination de l'énergie propre $\Sigma^\star_{20}$ et nous utilisons un potentiel modèle, correspondant à des particules d'une taille comparable à a et dont la transformée de Fourier est donnée par :

$$\tilde{V}_{\text{int}}(\vec{p}) = \begin{cases} U_0 & \text{pour } |\vec{p}| < 1/a \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad \text{(B.49)}$$

Deux paramètres sans dimension apparaissent dans nos calculs :

$$\alpha = \frac{mU_0}{a\hbar^2} \quad \text{et} \quad \delta = \sqrt{n_0 a^3} \ll 1 \quad \text{(B.50)}$$

A l'ordre le plus bas, l'énergie propre $\Sigma^\star_{20}$ est donnée par :

$\hbar\Sigma^{(1)}_{20} =$ 

$= n_0 \tilde{V}_{\text{int}}(\vec{p})$ (B.51)

et le potentiel chimique μ par :

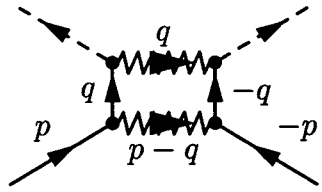
$$\mu^{(1)} = \left\langle 0 \mid \frac{\partial \hat{V}}{\partial N_0} \mid 0 \right\rangle \quad \text{(B.52)}$$

$$= 2E_0 N_0^{-1} + N_0^{-1} \left\langle 0 \mid \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4 \mid 0 \right\rangle + (2N_0)^{-1} \left\langle 0 \mid \hat{V}_5 + \hat{V}_6 \mid 0 \right\rangle \quad \text{(B.53)}$$

$$= n_0 \tilde{V}_{\text{int}}(0) = n_0 U_0 \quad \text{(B.54)}$$

comme les opérateurs de champ des $\hat{V}_i$ annihilent le vide.

La seule contribution non-nulle à l'énergie propre au deuxième ordre vient du diagramme suivant :

$\hbar\Sigma_{20}^{(2)} =$ 

$\propto n_0 \int G^{(0)}(q)G^{(0)}(-q)\tilde{V}_{\text{int}}(\vec{q})\tilde{V}_{\text{int}}(\vec{p}-\vec{q})d^4q$

(B.55)

Compte tenu de (B.35) et en intégrant sur q_0 on trouve :

$$\hbar\Sigma_{20}^{(2)} \propto n_0 U_0^2 \int_{\substack{|\vec{q}|a<1 \\ |\vec{p}-\vec{q}|a<1}} d^3\vec{q} \int \frac{dq_0}{(q_0 + \mu\hbar^{-1} - \omega_{\vec{q}} + i\eta)\,(-q_0 + \mu\hbar^{-1} - \omega_{\vec{q}} + i\eta)} \tag{B.56}$$

$$\approx n_o U_0^2 \int_{\substack{|\vec{q}|a<1 \\ |\vec{p}-\vec{q}|a<1}} d^3\vec{q} \frac{1}{\mu\hbar^{-1} - \omega_{\vec{q}} + i\eta} \tag{B.57}$$

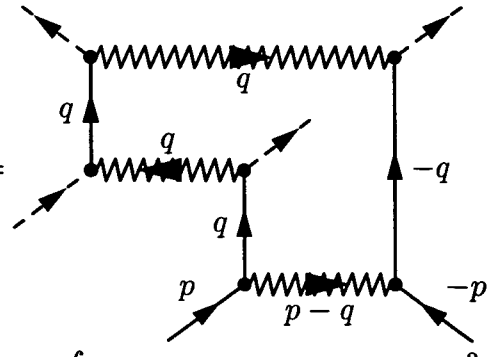
Le domaine d'intégration devient maximale pour des impulsions $\vec{p} \approx 0$. Dans ce cas, la contribution principale vient des valeurs q proches de $1/a$, pour lesquelles le potentiel chimique est négligeable devant l'énergie associée à q :

$$\mu/\hbar\omega_{1/a} \approx n_0 U_0 a^2 = \alpha\delta^2 \ll 1 \tag{B.58}$$

Il s'en suit que :

$$\hbar\Sigma_{20}^{(2)} \approx n_0 U_0^2/a = \alpha\Sigma_{20}^{(1)} \tag{B.59}$$

Étudions les termes d'ordre trois, par exemple un terme qui contient en plus une fonction de Green d'une particule hors condensat :

$\hbar\Sigma_{20}^{(3)-a} =$ 

(B.60)

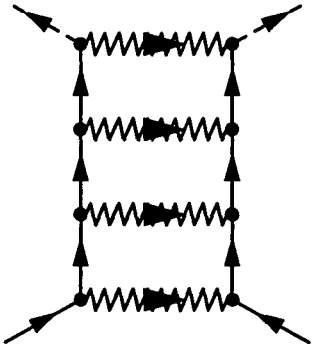
$$\propto n_0^2 \int \left[G^{(0)}(q)\right]^2 G^{(0)}(-q) \left[\tilde{V}_{\text{int}}(q)\right]^2 \tilde{V}_{\text{int}}(p-q)d^4q \tag{B.61}$$

$$\approx n_0^2 U_0^3 \int \frac{d^3\vec{q}}{\left[\mu\hbar^{-1} - \omega_{\vec{q}} + i\eta\right]^2} \tag{B.62}$$

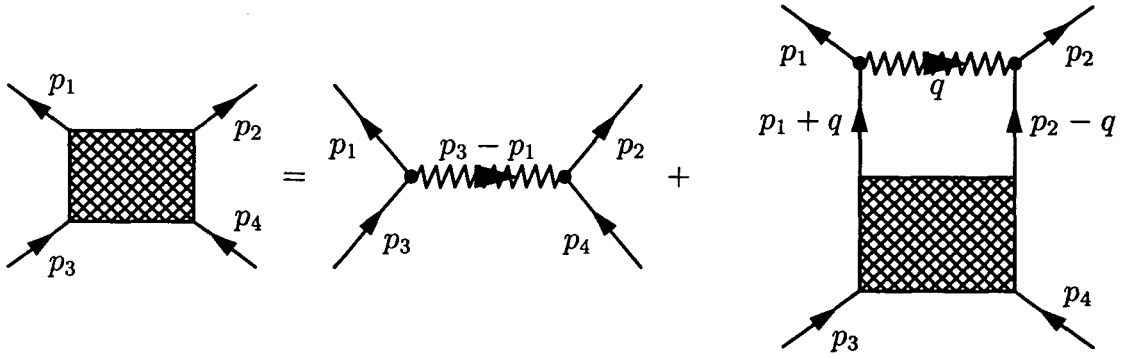
Cette fois, l'intégrant converge pour des grandes impulsions q, de sorte que la contribution principale vient maintenant du domaine où $\hbar\omega_{\vec{q}} \approx \mu \approx n_0 U_0$, d'où :

$$\hbar\Sigma_{20}^{(3)-a} \approx n_0^2 U_0^3 / \sqrt{\mu\hbar^{-1}} = \Sigma_{20}^{(1)} \alpha^{3/2} \delta \tag{B.63}$$

Nous observons que la ligne correspondant à une particule hors condensat supplémentaire introduit une fonction de Green de plus qui fait converger l'intégrale à la limite supérieure de sorte que ce type de diagramme acquièrt un facteur $\delta \ll 1$ par rapport aux diagrammes ne contenant que deux lignes continuées en trait plain. Dans la limite de faible densité ($\delta \ll 1$) il est alors suffisant de ne garder que les diagrammes en « *échelle* » comme par exemple :



Nous definissons alors une « *interaction effective* », qui resomme tous les diagrammes d'ordre nul dans le paramètre de dilution δ, les diagrammes en échelle, par une équation du type de *Bethe-Salpeter* :



$$\Gamma(p_1 p_2; p_3 p_4) = \tilde{V}_{\text{int}}(p_3 - p_1) + \frac{i}{\hbar}\int d^4 q G^0(p_1 + q) G^0(p_2 - q) \times \tilde{V}_{\text{int}}(q)\Gamma(p_1 + q, p_2 - q; p_3 p_4) \tag{B.64}$$

où nous avons omis les distributions de Dirac de conservation de l'impulsion aux vertex. En utilsant ces lois de conservation, il est possible de réduire l'espace des paramètres de Γ :

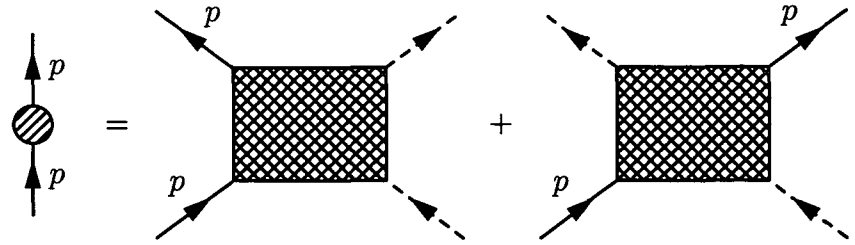
$$\Gamma(p_1 p_2; p_3 p_4) \to \Gamma(\vec{p}, \vec{p'}; P) \tag{B.65}$$

où nous avons utilisé les définitions des impulsions relatives et du centre de masse :

$$p_1 + p_2 = P' \qquad p_3 + p_4 = P \tag{B.66}$$

$$\frac{1}{2}(p_1 - p_2) = p' \qquad \frac{1}{2}(p_3 - p_4) = p \tag{B.67}$$

Énergies propres dans l'approximation d'échelle Dans la suite nous aurons besoin des expressions des énergies propres dans l'approximation d'échelle. Pour l'énergie propre d'une particule entrant et une sortant, nous trouvons :



(B.68a)

$$\hbar\Sigma^{\star}_{11} = n_0\Gamma(\tfrac{1}{2}\vec{p}, \tfrac{1}{2}\vec{p}; p) + n_0\Gamma(-\tfrac{1}{2}\vec{p}, \tfrac{1}{2}\vec{p}; p)$$

Pour les deux autres formes, on trouve de la même façon :

$$\hbar\Sigma^{\star}_{02} = n_0\Gamma(\vec{p}, 0; 0) \tag{B.68b}$$

$$\hbar\Sigma^{\star}_{20} = n_0\Gamma(0, \vec{p}; 0) \tag{B.68c}$$

Interaction effective en fonction de l'amplitude de diffusion En résolvant les équations intégrales dites de *Galitskii*,[2] il est possible d'exprimer Γ en fonction de l'amplitude de diffusion généralisée $\tilde{f}$, définie – en fonction de la fonction d'onde de diffusion $\Psi_{\vec{k}}$ en représentation impulsion – par :

$$\tilde{f}(\vec{k}', \vec{k}) = -4\pi f(\vec{k}', \vec{k}) = (2\pi)^{-3} \int d^3\vec{q}\, \tilde{V}_{\text{int}}(\vec{q}) \Psi_{\vec{k}}(\vec{k}' - \vec{q}) \tag{B.69}$$

Après un calcul long ([21: §3]), on trouve :

$$\frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\vec{p}, \vec{p}'; P) = \tilde{f}(\vec{p}, \vec{p}') + \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\vec{p}, \vec{k}) \times \left(\frac{1}{mP_0/\hbar - \left|\vec{P}\right|^2/4 + 2m\mu/\hbar^2 - \left|\vec{k}\right|^2 + i\eta} + \frac{1}{\left|\vec{k}\right|^2 - |\vec{p}'|^2 - i\eta} \right) \tilde{f}(\vec{p}', \vec{k})^{\star} \tag{B.70}$$

2. Galitskii ([23]) a travaillé sur l'application de la théorie de champ au problème à N corps dans le cas de fermions au même moment que Beliaev a étudié les gaz de bosons

B.4 Potentiel de sphères dures

L'expression (B.70) qui exprime l'interaction effective en fonction des amplitudes de diffusion nous permet de traiter des potentiels pour lesquelles les théories habituelles de perturbation en puissances d'interaction ne sont pas applicables parce que la série du développement diverge. Dans la suite nous allons voir comment le formalisme développé jusqu'ici nous permet de trouver l'énergie par particule d'un gaz dilué de sphères dures.

Le potentiel effectif pour des sphères dures Nous n'avons besoin que d'expressions dans la limite de grandes longueurs d'onde. Dans la limite de petites valeurs de $\vec{k}$, le déphasage de diffusion d'onde s, $\eta_0(k)$, pour un potentiel de sphères dures de diamètre a est donné par :

$$\eta_0(k) \approx -ka + O[(ka)^3] \tag{B.71}$$

alors que les déphasages des autres ondes partielles sont au moins aussi de l'ordre $O[(ka)^{(2l+1)}]$, de sorte que nous pouvons écrire :

$$\tilde{f}(\vec{k},\vec{k'}) \approx -4\pi \left(\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} \mathrm{e}^{i\eta_l} \sin\eta_l P_l(\cos\theta) \right) \tag{B.72}$$

$$\approx -4\pi \left(\frac{1+i\eta_0}{k}\eta_0 + O[k^2a^3] \right) \qquad \approx 4\pi a - 4\pi i a^2 k \tag{B.73}$$

d'où – avec (B.70) – :

$$\frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\vec{q},\vec{q},P) \approx 4\pi a - 4\pi i|\vec{q}|a^2$$

$$+ 4\pi a^2 \int \frac{\vec{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{mP_0/\hbar - \left|\vec{P}\right|^2/4 + 2m\mu/\hbar^2 - \left|\vec{k}\right|^2 + i\eta} + \frac{1}{\left|\vec{k}\right|^2 - |\vec{q}|^2 - i\eta} \right) \tag{B.74}$$

Les formes de l'énergie propre En premier ordre en diamètre des sphères dures, les expressions des énergies propres sont obtenues en combinant (B.74) et (B.68a)–(B.68c) :

$$\hbar\Sigma_{11}^{\star(1)} = 8\pi n_0 a\hbar^2/m \tag{B.75a}$$

$$\hbar\Sigma_{02}^{\star(1)} = 4\pi n_0 a\hbar^2/m \tag{B.75b}$$

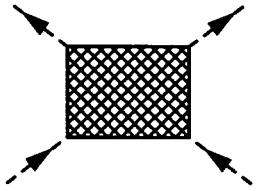
$$\hbar\Sigma_{20}^{\star(1)} = 4\pi n_0 a\hbar^2/m \tag{B.75c}$$

Ce sont d'ailleurs les mêmes formes que l'on obtiendrait, si on remplaçait le potentiel d'interaction $V(x)$ par un pseudo-potentiel $V_{\text{pseudo}}(x) = 4\pi a\hbar^2/m\delta(x)$ et développait les énergies en premier ordre en V_{pseudo}.

Le potentiel chimique Le potentiel chimique apparait dans les fonctions de Green et nous permettra de calculer l'énergie par particule. Nous le déterminons ici en fonction de l'amplitude de diffusion à partir de l'expression (B.25). En passant dans la représentation d'interaction, nous obtenons :

$$\mu = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_m \times \left\langle 0 \mid T\left[\hat{K}_1(t_1)\ldots\hat{K}_1(t_m)\,\frac{\partial \hat{V}}{\partial N_0}\bigg|_{t=0}\right] \mid 0 \right\rangle_{\text{connectés}} \tag{B.76}$$

Dans notre approximation du gaz dilué, nous ne retenons que les diagrammes en échelle. Il faut alors créer deux particules à partir du condensat, les laisser interagir plusieures fois et puis les désexciter dans le condensat. Comme $\partial\hat{V}/\partial N_0$ ne contient pas de terme d'interaction entre deux particules qui se trouvent avant et après la collision au dehors du condensat, la dérivée de l'expression précédente se réduit à $N_0^{-1}(\hat{V}_{1a} + \hat{V}_{1b})$, d'où :

$N_0\mu =$  (B.77)

La valeur de μ s'obtient alors en remplaçant $\tilde{V}_{\text{int}}(q)$ de l'expression (B.54) par $\Gamma(0,0;0)$:

$$\mu \approx n_0\Gamma(0,0;0) \tag{B.78}$$

Pour des sphères dures nous obtenons avec (B.74) au premier ordre :

$$\mu^{(1)} \approx \frac{4\pi a\hbar^2 n_0}{m} \tag{B.79}$$

La fonction de Green Munis des résultats précédents ((B.48), (B.75) et (B.79)) nous sommes en mesure de calculer la fonction de Green pour un gaz dilué de sphères dures pour des faibles impulsions. Comme l'énergie propre, $\Sigma_{11}^{\star(1)}$ ne depend pas de l'impulsion dans l'ordre consideré, la partie antisymétrique, $A^{(1)}(p)$, s'annule, et la partie symétrique est donnée par :

$$S^{(1)}(p) = \Sigma_{11}^{\star(1)} = 8\pi n_0 a\hbar/m = 2\mu^{-1}/\hbar = 2\Sigma_{20}^{\star(1)} = 2\Sigma_{02}^{\star(1)} \tag{B.80}$$

On trouve :

$$G'(p) = \frac{p_0 + \omega_{\vec{p}} + 4\pi a\hbar n_0/m}{p_0^2 - (E_p/\hbar)^2} \tag{B.81}$$

avec l'énergie d'excitation :

$$E_{\vec{p}} = \sqrt{\hbar^2\omega_{\vec{p}}^2 + 8\pi a\hbar^3\omega_{\vec{p}} n_0/m} \approx \sqrt{\hbar\omega_{\vec{p}}}\,4\pi a\hbar^2 n_0/m \tag{B.82}$$

Nous allons expliciter les deux pôles de G'. Pour assurer que la transformée de Fourier temporelle existe de façon non-triviale, il faut introduire des facteurs de convergence $i\eta$, dont le signe est fixé par le fait que, pour un processus de création de particule suivi de destruction, la fréquence de résonance est positve :[3]

$$G'(p) = \frac{\frac{1}{2}\left[E_{\vec{p}}^{-1}(\hbar\omega_{\vec{p}} + 4\pi a\hbar^2 n_0/m) + 1\right]}{p_0 - E_{\vec{p}}/\hbar + i\eta} - \frac{\frac{1}{2}\left[E_{\vec{p}}^{-1}(\hbar\omega_{\vec{p}} + 4\pi a\hbar^2 n_0/m) - 1\right]}{p_0 + E_{\vec{p}}/\hbar + i\eta} \tag{B.83}$$

A l'aide de la fonction de Green nous pouvons déterminer la densité de particules n :

$$n - n_0 = (2\pi)^{-4} \int \mathrm{d}^4 q \; iG'(q)\mathrm{e}^{iq_0\eta} \tag{B.84}$$

Dans cette intégration seulement le pôle à fréquence negative intervient :[4]

$$= (2\pi)^{-3} \int \mathrm{d}^3\vec{q}\, \frac{1}{2}\left[E_{\vec{q}}^{-1}(\hbar\omega_{\vec{q}} + 4\pi a\hbar^2 n_0/m) - 1\right] \tag{B.85}$$

en remplaçant $\omega_{\vec{q}} = \hbar q^2/2m$ et en effectuant un changement de variable, $y^2 = \frac{q^2}{8\pi a n_0}$:

$$= (4\pi)\frac{1}{2(2\pi)^3}(8\pi a n_0)^{3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}y\, y^2 \left[\frac{y^2+1}{[y^4+2y^2]^{1/2}} - 1\right] \tag{B.86}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}(8\pi a n_0)^{3/2} \left(\frac{x^2}{3} - \frac{1}{3}\right)\sqrt{x^2+2} - \frac{x^3}{3}\Big|_0^\infty \tag{B.87}$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{12\pi^2}(8\pi a n_0)^{3/2} = \frac{8}{3}\pi^{-1/2}(n_0 a)^{3/2} \tag{B.88}$$

Dans la limite que nous avons considérée ici, $n \approx n_0$, on obtient un *dépeuplement du condensat* dû aux interactions donné par :

$$\frac{n - n_0}{n} \approx \frac{8}{3}\sqrt{\frac{na^3}{\pi}} \tag{B.89}$$

L'énergie de l'état fondamental s'obtient en calculant la moyenne d'ensemble de $\hat{T} + \hat{V}$ ([26: (19.23)] :

$$E = \langle \hat{T} + \hat{V} \rangle = \frac{1}{2}\mu N + \frac{1}{2}\mathscr{V} \int \frac{\mathrm{d}^4 q}{(2\pi)^4}\left(\hbar q_0 + \frac{\hbar^2\vec{q}^2}{2m}\right) iG'(q)\mathrm{e}^{iq_0\eta} \tag{B.90}$$

d'où :

$$\frac{E}{\mathscr{V}} = \frac{1}{2}\mu n + \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{q}}{32\pi^3}\left[E_{\vec{q}}^{-1}(\hbar\omega_{\vec{q}} + 4\pi a\hbar^2 n_0/m) - 1\right] \tag{B.91}$$

$$= \frac{1}{2}\mu n - \frac{64\pi^2(n_0 a)^{5/2}\hbar^2}{15m} \approx \frac{1}{2}\mu n - \frac{64\pi^2(na)^{5/2}\hbar^2}{15m} \tag{B.92}$$

3. Rappel : $i\,G'(\vec{x}t, \vec{x}'t')\Big|_{t>0} = \left\langle \mathbf{O} \mid \hat{\phi}_K(x)\hat{\phi}_K^\dagger(x') \mid \mathbf{O} \right\rangle$

Pour éliminer le potentiel chimique de cette expression nous supposons que μ est de la forme suivante ([104]):

$$\mu = 4\pi an\hbar^2/m\left[1 + (na^3)^{1/2}\right] \tag{B.93}$$

Sachant que mu correspond à la dérivée partielle de l'énergie par rapport au nombre de particules, on peut déterminer le coéfficient α : $\alpha = 32/3\pi^{1/2}$. On obtient finalement :

$$\boxed{\frac{E}{N} = \frac{2\pi na\hbar^2}{m}\left[1 + \frac{128}{15}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{1/2}\right]} \tag{B.94}$$

Ce résultat a d'abord été obtenu par Lee et Yang ([105, 106]) dans le cadre de l'approximation des *collisions binaires*. L'utilisation de la théorie du pseudopotentiel a également aboutit à cette valeur ([32]). Le terme d'ordre suivant ($O[(na^3)\mathrm{Log}na^3]$) a été obtenu dans la suite.

Annexe C. Notations

Definitions dans des notes de bas de pages sont notées n.

Notation	Définition	Page
$\stackrel{\text{def}}{=}$	Egal *per definitionem*	
$:=$	Premier membre est définit par le second	
$y \to x_+$	y tend d'en haut vers x	
A	Antisymétriseur	13
A_n	Antisymétriseur à n particules	
a	Longueur de diffusion	
b	Portée de potentiel	
β	« Température inverse »: $\beta = 1/(k_B T)$	
C_l	Cycle d'échange de l particules	20n
div	Division avec résultat entier sans reste	
$E(k)$	Energie correspondant au vecteur d'onde k du mouvement « *relatif* »: $E(k) = \hbar^2 k^2/m$	
F	Energie libre	
f	Facteur de Fermi/Dirac resp. Bose/Einstein en forme opératorielle	16
$f(\mathbf{k})$	Elément de matrice de f	
$\tilde{f}(\vec{k'}, \vec{k})$	Amplitude de diffusion généralisée	161
f	Facteur de comptage des diagrammes	15
$\hbar$	Constante de Heisenberg	
$\mathfrak{H}_0$	Hamiltonien à une particule sans potentiel extérieure: $\mathfrak{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$	
$\mathfrak{H}_1$	Hamiltonien à une particule: $\mathfrak{H}_1 = \mathfrak{H}_0 + V_{\text{ext}}$	
$\mathfrak{H}_2$	Hamiltonien à deux particules: $\mathfrak{H}_2(1,2) = \mathfrak{H}_1(1) + \mathfrak{H}_1(2) + V_{\text{int}}(1,2)$	
$\mathfrak{H}_{\text{Bog}}$	Hamiltonien de Bogoliubov	152
$\mathfrak{H}_{\text{rel}}$	Hamiltonien relatif avec potentiel d'interaction	
$\mathfrak{H}_{\text{rel}}^{(0)}$	Hamiltonien relatif sans potentiel d'interaction	
η	Facteur de symétrie quantique (= +1 pour bosons, = −1 pour fermions)	27
$\eta_l(k)$	Déphasage dans l'onde partielle l	
$j_l(z)$	Fonction de Bessel sphérique d'ordre l	
k_B	Constante de Boltzmann	
k_F	Vecteur d'onde de Fermi	
λ_T	Longueur d'onde thermique: $\lambda_T = \hbar\sqrt{2\pi/mk_BT}$	5
$[\text{Log}\,\mathcal{Z}_{\text{gc}}]_{i.g.}$	Contribution à Log $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ du gaz parfait	57

$m_l(z)$	Module des fonctions sphériques j_l et n_l	116
$\mathfrak{m}_l(k)$	« Accumulant de phase » dans l'expression du déphasage $\eta_l(k)$	117
μ	Potentiel chimique	
N	Nombre de particules	
n	Densité de particules	6
n_0	Densité de particules dans l'état d'impulsion nulle	151
$n_l(z)$	Fonction de von Neumann sphérique d'ordre l	
Ω	Grand potentiel $\Omega = F - \mu N$	26
P_α	Opérateur de permutation général $P_{(2,1,3)}$ échange particules 1 et 2, particule 3 reste inchangée	
P_{ex}	Opérateur de permutation de deux particules	
$\hat{\vec{r}}$	Opérateur position	137
ρ_1^β	Opérateur densité (quantique) : $\exp[-\beta\mathfrak{H}_1]$	129
ρ_2^β	Opérateur densité (quantique) : $\exp[-\beta\mathfrak{H}_2]$	129
ρ_I	Opérateur densité réduit à un corps (ensemble grand-canonique)	52
ρ_{II}	Opérateur densité réduit à deux corps (ensemble grand-canonique)	52
ρ_{N}	Densité normale	135
ρ_{S}	Densité superfluide	135
S	Symétriseur	13
S_n	Symétriseur à n particules	
sgn	Fonction « *signum* » : rend le signe de son argument ($+1$, 0 ou -1)	
T	Température	
$T[\ldots]$	Produit temporel	154
$\hat{T}$	Opérateur d'énergie cinétique	152
$\Delta\tau$	Tranche de temps imaginaire	130
Trace	Somme sur tous les états des particules discernables; selon le cas la somme porte aussi sur le nombre de particules (ensemble grand-canonique)	
U_2	Opérateur d'Ursell d'ordre 2: $U_2 = \mathrm{e}^{-\beta\mathfrak{H}_2(1,2)} - \mathrm{e}^{-\beta[\mathfrak{H}_1(1)+\mathfrak{H}_1(2)]}$	14
$U_q^{S,A}$	Restriction de l'opérateur U_q à l'espace (anti-)symmétrisé	37
$[U_2]_{\text{rel}}$	Opérateur d'Ursell d'ordre 2 *relatif*: $[U_2]_{\text{rel}} := \mathrm{e}^{-\beta\mathfrak{H}_{\text{rel}}} - \mathrm{e}^{-\beta\mathfrak{H}_{\text{rel}}^{(0)}}$ ($[U_2]_{\text{rel}}$ est un opérateur à une particule)	69
$\widehat{U}_2$	Opérateur d'Ursell « habillé » par des facteurs d'occupation de l'espace de moments	46
$\overline{U}_q$	Opérateur d'Ursell d'ordre q en « représentation d'interaction » : $\overline{U}_q(1,\ldots,q) = \mathrm{e}^{\beta[\mathfrak{H}_1(1)+\ldots+\mathfrak{H}_1(q)]}\, U_q(1,\ldots,q)$	
$\overline{U}_2^{\text{rel}}$	Partie relative de l'opérateur d'Ursell d'ordre 2	110

	en « représentation d'interaction »	
$\hat{V}$	Opérateur d'énergie potentielle d'interaction	152
$\hat{V}_{\text{Bog}}$	Opérateur d'énergie potentielle dans l'approximation de Bogogliubov	152
V_{ext}	Potentiel extérieur	
V_{int}	Potentiel d'interaction	13
$\tilde{V}_{\text{int}}$	Transformée de Fourier du potentiel d'interaction	127
$\mathscr{V}$	Volume	
$\mathbf{W}$	Nombre d'enroulement	137
$\mathbf{x}(\tau)$	Chemin (à nombre de composantes non-specifié) en fonction d'un temps imaginaire τ	129
ξ	Longueur de corrélation	138
$\Xi_{1\times U_2}$	Contribution à Log $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ des diagrammes à un opérateur U_2 (nombre infini de U_1)	16
$\Xi_{\text{gaz parfait}}$	Contribution à Log $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ du gaz parfait (seulement des opérateurs U_1)	15
Ξ_{paires}	Contribution à Log $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ de la formation de paires	47
Ξ_{triplets}	Contribution à Log $\mathcal{Z}_{\text{gc}}$ de la formation de triplets	50
y	Paramètre de l'extrapolation par changement d'échelle	138
Y_l^m	Harmonique sphérique	
$\mathcal{Z}_{\text{gc}}$	Fonction de partition grand-canonique	13

Bibliographie

[1] A. EINSTEIN, *Preussische Akademie der Wissenschaften, Phys. Math. Klasse, Sitzungsberichte*, (3), 1925. Dans « Œuvres choisies », Volume I. Seuil-CNRS.

[2] A. GRIFFIN, D. SNOKE, et S. STRINGARI, editeurs. Cambridge University Press, 1993.

[3] R. FRISCH, *Z. Physik*, **86**, 42, 1933.

[4] T. W. HÄNSCH et A. L. SCHAWLOW, *Opt. Comm.*, **13**, 68, 1975.

[5] S. CHU, J. E. BJORKHOLM, A. ASHKIN, et A. CABLE, *Phys. Rev. Let.*, **57**, 314, 1986.

[6] J. DALIBARD et C. COHEN-TANNOUDJI, *J. Opt. Soc. Am.*, **B 6**, 1989.

[7] A. ASPECT, E. ARIMONDO, R. KAISER, N. VANSTEENKISTE, et C. COHEN-TANNOUDJI, *Phys. Rev. Let.*, **61**, 826, 1988.

[8] M. KASEVICH et S. CHU, *Phys. Rev. Let.*, **69**, 1741, 1992.

[9] A. L. MIGDALL, J. V. PRODAN, W. D. PHILLIPS, T. H. BERGEMAN, et H. J. METCALF, *Phys. Rev. Let.*, **54**, 2596, 1985.

[10] E. L. RAAB, M. PRENTISS, A. CABLE, S. CHU, et D. E. PRITCHARD, *Phys. Rev. Let.*, **59**, 2631, 1987.

[11] H. F. HESS, *Bull. Am. Phys. Soc*, **30**, 854, 1985.

[12] H. F. HESS, *Phys. Rev. B*, **34**, 3476, 1986.

[13] L. L. CHASE, N. PEYGHAMBARIAN, G. GRYNBERG, et A. MYSYROWICZ, *Phys. Rev. Let.*, **42**, 1231, 1979.

[14] J. L. LIN et J. P. WOLFE, *Phys. Rev. Let.*, **71**, 1222, 1993.

[15] E. A. CORNELL, M. H. ANDERSON, J. R. ENSHER, M. R. MATTHEWS, et C. E. WIEMAN, *Science*, **269**, 198, 1995.

[16] K. B. DAVIS, M.-O. MEWES, M. R. ANDREWS, N. J. VAN DRUTEN, D. S. DURFEE, D. M. KURN, et W. KETTERLE, *Phys. Rev. Let.*, **75**, 3969, 1995.

[17] C. C. BRADLEY, C. A. SACKETT, J. J. TOLLETT, et R. G. HULET, *Phys. Rev. Let.*, **75**, 1687, 1995.

[18] Y. KAGAN, G. V. SHLYAPNIKOV, et J. T. M. WALRAVEN, *Phys. Rev. Let.*, **76**, 2670, 1996.

[19] M. LEWENSTEIN et L. YOU, *Phys. Rev. A*, **53**, 909–915, 1996.

[20] E. M. LIFSHITZ et L. P. PITAEVSKII. *Landau and Lifshitz course of Theor. Phys., volume 9, Statistical Physics*. Pergamon Press, 1980.

[21] S. BELYAEV, *Soviet Physics JETP*, **34**, 289, 1958.

[22] S. BELYAEV, *Soviet Physics JETP*, **34**, 417, 1958.

[23] V. M. GALITSKII, *Soviet Physics JETP*, **34**, 151, 1958.

[24] E. P. GROSS, *Nuevo Cimento*, **20**, 454, 1961.

[25] L. P. PITAEVSKII, *Soviet Physics JETP*, **13**, 451, 1961.

[26] A. L. FETTER et J. D. WALECKA. *Quantum Theory of Many-Particle System*. McGraw-Hill, 1971.

[27] W. L. MCMILLAN, *Phys. Rev. A*, **138**, 442, 1965.

[28] M. H. KALOS, D. LEVESQUE, et L. VERLET, *Phys. Rev.*, **9**, 2178, 1974.

[29] M. H. KALOS, M. A. LEE, . A. WHITLOCK, et G. V. CHESTER, *Phys. Rev. B*, **24**, 115, 1981.

[30] K. HUANG et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **105**, 767–775, 1957.

[31] K. HUANG, C. N. YANG, et J. M. LUTTINGER, *Phys. Rev.*, **105**, 776, 1957.

[32] T. D. LEE, K. HUANG, et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **106**, 1135, 1957.

[33] T. D. LEE et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **112**, 1419, 1958.

[34] T. D. LEE et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **113**, 1406, 1959.

[35] E. P. WIGNER, *Phys. Rev.*, **43**, 252, 1933.

[36] J. M. BLATT et V. F. WEISSKOPF. *Theoretical Nuclear Physics*, page 74. John Wiley and Sons, 1952.

[37] G. BAYM et C. J. PETHICK, *Phys. Rev. Let.*, **76**(1), 6, 1996.

[38] J. T. M. WALRAVEN, *Rev. Mod. Phys.* à paraître.

[39] H. D. URSELL, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **23**, 685, 1927.

[40] J. E. MAYER et M. G. MAYER. *Statistical Mechanics*, chapitre 13. John Wiley and Sons, 1940.

[41] G. E. UHLENBECK et E. BETH, *Physica*, **III**, 729–745, 1936.

[42] E. BETH et G. E. UHLENBECK, *Physica*, **IV**, 915, 1937.

[43] B. KAHN et G. E. UHLENBECK, *Physica*, **V**, 399, 1938.

[44] T. D. LEE et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **113**, 1165, 1959.

[45] T. D. LEE et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **116**, 25, 1959.

[46] T. D. LEE et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **117**, 12, 22, 1960.

[47] R. K. PATHRIA. *Statistical Mechanics*. Pergamon Press, Oxford, 1972.

[48] K. HUANG. *Statistical Mechanics*. Wiley, second edition, 1987.

[49] P. GRÜTER et F. LALOË, *J. de Physique I*, **5**, 181, 1995.

[50] K. HUANG. § 10.3. Dans [48], Second edition, 1987. 1st edition (1963): § 14.3.

[51] E. M. LIFSHITZ et L. P. PITAEVSKII. §§ 6 et 25. Dans [20], 1980.

[52] R. BALIAN. exercises 12.d. Volume II de[107], 1992.

[53] K. HUANG. chapitre 10. Dans [48], Second edition, 1987. 1st edition (1963): chap. 14.

[54] F. LALOË. Dilute degenerate gases. Dans Griffin et al. [2].

[55] R. K. PATHRIA. § 9.6. Dans [47], 1972.

[56] K. HUANG. Dans *Studies in Statistical Mechanics*, volume II., North–Holland, 1964.

[57] C. N. YANG et T. D. LEE, *Phys. Rev.*, **87**, 404, 1952.

[58] J. E. MAYER, Journ. Chem. Phys. **5**, 67 (1937); J. E. MAYER ET P.G. ACKERMANN, ibid., page 74; J. E. MAYER ET S.F. HARRISSON, ibid. **6**, 87 (1938); S. F. HARRISSON ET J.E. MAYER, ibid. page 101.

[59] R. K. PATHRIA. § 9.7. Dans [47], 1972.

[60] F. MOHLING, *Phys. Rev. A*, **135**, 1964.

[61] E. W. MONTROLL et J. C. WARD, *Phys. Fluids*, **1**, 55, 1958.

[62] C. BLOCH et C. DE DOMINICIS, *Nuclear Physics*, **7**, 459, 1958.

[63] C. BLOCH et C. DE DOMINICIS, *Nuclear Physics*, **10**, 181, 1959.

[64] P. NOZIÈRES et S. SCHMITT-RINK, *J. Low Temp. Phys.*, **59**, 195, 1985.

[65] W. KRAUTH. Communication privée.

[66] J. M. BLATT. *Theory of Superconductivity*, chapitre III. Academic Press, 1964.

[67] M. APOSTOL, *Phys. Lett.*, **110A**, 141, 1985.

[68] P. GRÜTER et F. LALOË, *J. de Physique I*, **5**, 1255, 1995.

[69] J. A. MCLENNAN. *Introduction to nonequilibrium statistical mechanics*, chapitre 7. Prentice Hall, 1989.

[70] R. F. SNIDER, *J. Chem. Phys.*, **32**, 1051, 1960.

[71] E. LIFCHITZ et L. PITAYEVSKI. *Landau and Lifshitz course of Theor. Phys., Electrodynamique des milieux continus*. 1990. traduction française.

[72] O. MORICE, Y. CASTIN, et J. DALIBARD, *Phys. Rev.*, **A**, 3896, 1995.

[73] J. A. MCLENNAN. *Introduction to nonequilibrium statistical mechanics*, chapitre 8. Prentice Hall, 1989.

[74] P. GRÜTER, F. LALOË, A. MEYEROVITCH, et W. MULLIN, *J. de Physique I*, 1996. à paraître.

[75] K. HUANG. § 10.3. Dans [48], Second edition, 1987.

[76] K. HUANG. § 10.5. Dans [48], Second edition, 1987. 1st edition (1963): § 13.3.

[77] T. J. GREYTAK et D. KLEPPNER. "Lectures on spin polarized hydrogen", Dans G. GRYNDBERG et R. STORA, editeurs, *"Tendances actuelles en physique atomique"*., Elsevier, 1984.

[78] I. F. SILVERA et J. T. M. WALRAVEN. Spin polarized atomic hydrogen, Dans D. F. BREWER, editeur, *Progress in Low Temperature Physics*., North Holland, Amsterdam, 1986.

[79] M. ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, Inc., New York,??

[80] F. LONDON. *Superfluids*, volume II, chapitre B. John Wiley and Sons, 1954.

[81] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, et F. LALOË. *Quantum Mechanics*, volume II. John Wiley and Sons, 1977.

[82] R. COURANT et D. HILBERT. *Methods of Mathematical Physics*, volume I. Wiley Classics Edition, 1989.

[83] R. G. NEWTON. *Scattering Theory of Waves and Particles*. Springer Verlag, second edition, 1982.

[84] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, et F. LALOË. *Quantum Mechanics*, volume I. John Wiley and Sons, 1977.

[85] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING, et B. P. FLANNERY. *Numerical Recipes — The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, second edition, 1992.

[86] R. P. FEYNMAN, *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367, 1948.

[87] D. M. CEPERLEY, *Rev. Mod. Phys.*, **67**, 279, 1995.

[88] J. CAO et B. J. BERNE, *J. Chem. Phys*, **97**, 2382, 1992.

[89] D. M. CEPERLEY et E. L. POLLOCK, *Phys. Rev. Let.*, **56**, 351, 1986.

[90] R. P. FEYNMAN, *Phys. Rev.*, **90**, 1116, 1953.

[91] R. P. FEYNMAN, *Phys. Rev.*, **91**, 1291, 1953.

[92] E. L. POLLOCK et D. M. CEPERLEY, *Phys. Rev. B*, **36**, 8343, 1987.

[93] G. B. HESS et W. M. FAIRBANK, *Phys. Rev. Let.*, page 216, 1967.

[94] M. N. BARBER. Finite-size scaling. Dans *Phase Transitions and Critical Phenomena*, volume 8, pages 146–266., Academic Press, 1983.

[95] G. AHLERS et D. S. GREWALL, *Phys. Rev. A*, **7**, 2145, 1973.

[96] C. LE GUILLOU et J. ZINN-JUSTIN, *Phys. Rev. Let.*, **39**, 95, 1977.

[97] E. L. POLLOCK et K. K. RUNGE, *Phys. Rev. B*, **46**, 3535, 1992.

[98] M. E. FISHER, M. N. BARBER, et D. JASNOW, *Phys. Rev. A*, **8**, 1111, 1973.

[99] A. J. LEGGETT, *Phys. Fenn.*, **8**, 125, 1973.

[100] T. JOLICŒUR. Communication privée.

[101] M. BIJLSMA et H. T. C. STOOF, *Phys. Rev. Let.*, 1996. à paraître.

[102] R. BALIAN. Volume I de[107], 1992.

[103] J. W. NEGELE et H. ORLAND. *Quantum Many-Particle Systems*. Addison-Wesley, 1992.

[104] N. M. HUGENHOLTZ et D. PINES, *Phys. Rev.*, **116**, 489, 1959.

[105] T. D. LEE et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **105**, 1119, 1957.

[106] T. D. LEE et C. N. YANG, *Phys. Rev.*, **117**, 12, 22, 1960.

[107] R. BALIAN. *"From microphysics to macrophysics"*. Springer Verlag, 1992.

Index

Agrégat, 6
    U-C, **20**
Amplitude de diffusion généralisée, 161

Beliaev, 3, **151**
Beth–Uhlenbeck, 6
    Formule de, 7, 32
    Formule généralisée de, 16, 59
Bethe-Salpeter
    Equation de, 160
Bogoliubov
    Remplacement de, 151

Classe, 26
Cluster, *voir* Agrégat
Collisions binaires
    Approximation des, 165
Condensation statistique, 43–50
Cycle d'échange, 20, 134
    de base, 23

Dépeuplement du condensat, 164
Déphasage, 117, 162
Densité
    Opérateur de $\sim$ réduit
      à deux particules, 56, 58
      à une particule, 56, 58
Diagramme
    Ξ-, 26
    Conventions, 40
    en échelle, 151, 160
    U-C, **21**
Dyson
    Équation de, 157

Energie
    de l'état fondamental, 164
Energie libre de torsion, 140
Energie propre, **156**
    Approximation d'échelle, 161
    Sphères dures, 162
Extrapolation
    par changement d'échelle, 134

Facteur de comptage, 23, 41
Feynman
    Règles de, 155
Finite–size scaling, *voir* Extrapolation par ...
Fonction de partition, 13
    grand–canonique, 24
Forme d'extrapolation, 138
Fraction superfluide ρ_S, 135

Galitskii, 3
    Équations intégrales de, 161
Gaz parfait, 27
Grand potentiel Ω, 26
Green
    Fonction de, 154, 155, 163
    Fonction de $\sim$ anomale, 156

Interaction effective, 160, 161

Kahn–Uhlenbeck, 7

Landau
    Théorie de, 3
Lee, 165

m_l: Module des fonctions sphèriques, 116

Nombre d'enroulement W, 137

Opérateur d'Ursell, *voir* Ursell, Opérateur de

Paires
    Classe de, 43
    opérateur densité réduit, **82**
Piège atomique, 2
Potentiel chimique, 163
Produit temporel, *voir* T-produit
Pseudopotentiel, **4**, 100, 101, 162, 165

Quasiparticule, 3

Refroidissement évaporatif, 2

Refroidissement par laser, 1
Relation de fermeture
    sphères dures, 120
Remplacement de Bogoliubov, *voir* Bogoliubov

Scaling form, *voir* Forme d'extrapolation
Sphères dures, 151, 162
    Energie propre, 162
    Fonction de Green, 163
Système quantique dégénéré–dilué, 1

T–produit, 151
Triplets
    Classe de, 48
Twist free energy, *voir* Energie libre de torsion

Ursell, 6
    Longueur de, 101
    Opérateur de, 19
      $2 \times U_2$, 34
      U_3, 37, 48

Yang, 165

Resumé

Nous décrivons une approche théorique nouvelle pour étudier des gaz dilués–dégénérés, le formalisme des opérateurs d'Ursell. Nous déterminons la fonction de partition d'un gaz quantique en deux étapes. Dans un premier temps les interactions sont traitées pour un système auxiliare de particules discernables dans une approximation de faible densité (le rapport entre portée du potentiel et distance moyenne entre particules étant beaucoup plus petit que l'unité). En second lieu la statistique quantique est introduite; aucune approximation est nécessaire pendant cette étape ce qui permet le traitement des gaz dégénérés.

Il nous est possible de déduire des expressions des opérateurs densité réduits à partir du potentiel thermodynamique. Nous sommes alors en mesure d'étudier des systèmes macroscopiques à l'échelle microscopique. Nous aboutissons à une expression de la fonction de corrélation d'un système de sphères dures qui reproduit les « bonnes » propriétés physiques même à courte distance, un grand avantage par rapport au méthodes habituelles du type de champ moyen.

Nous déterminons des expressions des quantités macroscopiques diverses dans une approximation valable pour des systèmes à faible densité (formule de Beth-Uhlenbeck généralisée). Le potentiel d'interaction y intervient par l'intermédiaire d'un nouveau paramètre, la longueur d'Ursell. Une comparaison de nos resultats avec ceux de la théorie des pseudopotentiel demontre que cette dernière donne une image acceptable des phénomènes pour des bosons. En revanche, pour des fermions, nous trouvons une différence importante: à température suffisamment basse, même des potentiels entièrement repulsives donnent lieu à une attraction effective.

Nous effectuons également une étude numérique sur la dependance de la tempértaure critique de condensation de Bose-Einstein d'un gaz de sphère dures bosoniques en fonction de la densité. Notre calcul des intégrales de chemin par une méthode Monte Carlo montre que cette température augmente par rapport à celle du gaz parfait à basse densité (maximal d'un facteur 1.07).

Mots clés

Gaz quantique dilué
Gaz quantique dégénéré
Opérateur d'Ursell
Opérateur densité réduit
Fonction de corrélation d'un gaz de sphères dures
Formule de Beth-Uhlenbeck généralisée
Longueur d'Ursell
Condensation de Bose-Einstein
Température critique
Intégration Monte Carlo

Contribution to the theory of dilute-degenerate gases

We present a new theoretical approach to describe dilute degenerate gases, the formalism of Ursell operators. The partition function of a quantum gas is obtained in two steps: first, we account for the interaction in an auxiliary system of distinguishable particles, making use of a low density approximation (the ratio between potential range and average interparticle spacing is assumed to be very small). In a second stage, quantum statistics are introduced; no approximations whatsoever are necessary in this step, which allows for the treatment of degenerate systems.

It is possible to derive expressions for reduced density operators from the thermodynamical potential. We are thus able to study macroscopic systems on a microscopic scale. An expression for the two-particle correlation function of a system of hard spheres is obtained which reproduces the "good" physical properties even at short relative distances. This presents a great advantage compared to usual methods of mean field theories.

We determine formulae for a variety of macroscopic quantities in an approximation which is valid for systems at low density (generalized Beth-Uhlenbeck formula). The interaction potential enters into these expressions by the means of a new parameter, the Ursell length. We compare our results to those of the pseudopotential theory and show that the latter gives a correct image of the physical phenomena for bosons. For fermions, however, we find an important difference: at sufficently low temperatures even entirely repulsive potentials give rise to an effective attraction.

We also made a numerical study of the dependence on density of the critical temperature of Bose-Einstein condensation in a bosonic hard sphere gas. Our calculus of path integrals by Monte Carlo methods shows that the critical temperature is increased compared to that of the ideal gas at low density (by a factor of 1.07 at most).

Key words

Dilute quantum gas
Degenerate quantum gas
Ursell operator
Reduced density operator
Correlation function of a hard sphere gas
Generalized Beth-Uhlenbeck formula
Ursell length
Bose-Einstein Condensation
Critical temperature
Monte Carlo integration