



HAL
open science

Contribution à la théorie des gaz de fermions ultrafroids fortement polarisés

Sébastien Giraud

► **To cite this version:**

Sébastien Giraud. Contribution à la théorie des gaz de fermions ultrafroids fortement polarisés. Matière Condensée [cond-mat]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2010. Français. NNT : . tel-00492339

HAL Id: tel-00492339

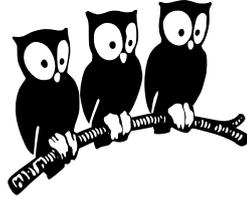
<https://theses.hal.science/tel-00492339>

Submitted on 15 Jun 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE
Département de Physique
Laboratoire de Physique Statistique



THÈSE DE DOCTORAT DE
L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE (PARIS VI)
Spécialité : Physique Quantique

présentée par

Sébastien GIRAUD

pour obtenir le titre de
Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)

**Contribution à la théorie des gaz de fermions
ultrafroids fortement polarisés**

Soutenue le 10 juin 2010 devant le jury composé de :

M. Claude ASLANGUL	Président du jury
M. Frédéric CHEVY	Examineur
M. Roland COMBESCOT	Directeur
M. Stefano GIORGINI	Rapporteur
M. Olivier JUILLET	Examineur
M. Xavier LEYRONAS	Codirecteur, invité
M. Peter SCHUCK	Examineur
M. Giancarlo STRINATI	Rapporteur

Remerciements

Cette thèse s'est déroulée de 2007 à 2010 au Laboratoire de Physique Statistique de l'École Normale Supérieure. Je suis reconnaissant envers toutes les personnes qui rendent cet environnement scientifique si dynamique et stimulant, et notamment Jean-Michel Raimond et Werner Krauth, les directeurs successifs du Département de Physique, et Éric Perez, le directeur du laboratoire.

Je tiens à remercier très chaleureusement mon directeur de thèse Roland Combescot pour sa disponibilité exemplaire, son dynamisme, sa rigueur, son enthousiasme et sa persévérance. Je l'ai connu en tant qu'enseignant à l'École Normale Supérieure où il m'a initié avec passion à la physique du solide et à la théorie de la supraconductivité. Au cours de ces quelques années de thèse, j'ai beaucoup appris en discutant avec lui. Il m'a montré une approche à la fois rigoureuse et constructive de la recherche. Son intuition physique et sa grande culture dans de nombreux domaines m'ont beaucoup aidé, j'espère que celles-ci auront un peu déteint sur moi. Je tiens également à souligner son encadrement qui a vraiment été parfait. Il a su me laisser une très grande autonomie tout en répondant à mes interrogations et en me guidant dans mes réflexions lorsque cela était nécessaire. Je conserverai longtemps l'excellent souvenir des heures passées dans son bureau.

Un grand merci également à mon codirecteur de thèse Xavier Leyronas pour les nombreuses discussions que nous avons eues, sa gentillesse et sa bonne humeur. Il a eu un regard attentif sur tous les problèmes qui ont été abordés pendant ces trois années et a pris part, avec beaucoup d'intérêt, aux réflexions qui ont contribué à cette thèse. Je le remercie pour ses nombreux conseils, notamment lors de la rédaction de ce manuscrit et la préparation des séminaires que j'ai donnés au cours de cette thèse.

J'ai la chance d'avoir un jury de grande qualité scientifique réunissant plusieurs experts du domaine. Je voudrais tout particulièrement remercier Stefano Giorgini et Giancarlo Strinati, qui m'ont fait l'honneur d'accepter la lourde tâche d'être rapporteurs de ma thèse, mais aussi tous les autres membres du jury – Claude Aslangul, Frédéric Chevy, Olivier Juillet, Peter Schuck – pour l'intérêt qu'ils ont manifesté pour cette thèse.

Ce travail de thèse a été mené dans un environnement très stimulant, où les interactions entre équipes et laboratoires facilitent grandement le déroulement des recherches. Je tiens à remercier tous les chercheurs que j'ai côtoyés, et en particulier ceux du groupe atomes froids du Laboratoire Kastler Brossel qui m'ont permis de mieux comprendre la physique de ces systèmes et les prouesses expérimentales réalisées dans ce domaine. J'exprime aussi toute ma reconnaissance aux secrétaires du LPS, M. Gefflot, A. Ribaudeau et N. Sadaoui, pour leur aide dans les formalités administratives et notamment la prépa-

ration des missions, ainsi qu'à F. Ayrault, Z. Dissi et R. Portier pour leurs compétences en informatique. Je remercie aussi tous les thésards que j'ai côtoyés et qui ont contribué à rendre ces trois années très agréables. Je pense tout particulièrement à Florent Alzetto qui a commencé sa thèse en même temps que moi dans notre équipe "Théorie des gaz fermioniques ultrafroids". Je garderai un excellent souvenir du tandem que nous avons formé et de nos nombreuses discussions. Je lui souhaite bonne chance pour la fin de sa thèse. Je dois aussi beaucoup aux « bosons » avec qui j'ai cohabité dans l'ex-DC21 où il règne une ambiance chaleureuse et propice au travail : je remercie les plus anciens qui m'ont accueilli, Damien, Hervé, Nestor, Laurent, Olaf et Carlos, ceux qui m'ont accompagné pendant une bonne partie de ces trois ans, Laetitia, Antoine, Miguel et Giorgio, et je souhaite bonne route à Marc qui nous a rejoints la dernière année. Je pense également aux autres thésards de l'équipe "Matière condensée", Maguelonne, Cédric et Etienne.

Parce que la thèse est l'achèvement d'un cursus scolaire, j'adresse mes plus sincères remerciements à tous les professeurs qui m'ont fait confiance et m'ont encouragé. J'espère être un jour aussi bon enseignant pour mes élèves qu'ils l'ont été pour moi. Je pense tout particulièrement à Michel Pierre et Arnaud Debussche, directeurs successifs du Département de Mathématiques de l'ENS Ker Lann, qui m'ont toujours soutenu dans ce double parcours mêlant la physique et les mathématiques, ainsi que Jean-Michel Launay pour ses conseils et ses encouragements. Je remercie aussi Bernard Piraux qui m'a confié un projet très intéressant lors de mon passage à Louvain-la-Neuve en 2005 et m'a donné l'envie de poursuivre dans la voie de la recherche en physique théorique.

Je pense enfin à tous ceux qui m'ont entouré pendant la réalisation de cette thèse et qui font que la vie ne se réduit pas à la physique, aux bosons et aux fermions. Mes premiers remerciements vont à mes parents. Je leur dois beaucoup, ce sont eux qui ont le plus contribué à ma réussite. Ils m'ont toujours encouragé à faire les études que je souhaitais, je leur en suis extrêmement reconnaissant. Merci aussi à mon frère Francis qui a tracé la route. Merci à toute ma famille qui m'apporte l'équilibre dont j'ai besoin, et à mes amis de Grenoble et de Rennes. Pour finir, je remercie Carine de tout mon cœur pour son amour et son soutien.

Table des matières

Remerciements	iii
Table des matières	v
Introduction	ix
1 Gaz de fermions ultrafroids	1
1.1 Propriétés des gaz de fermions étudiés	1
1.1.1 États hyperfins des atomes alcalins	1
1.1.2 Réalisation expérimentale	2
1.2 Interactions dans les gaz de fermions ultrafroids	3
1.2.1 Rappels de théorie de la diffusion	3
1.2.2 Modélisation de l'interaction	7
1.2.3 Résonance de Feshbach	9
1.2.4 Approximation de densité locale	12
1.3 Gaz de fermions non polarisés	13
1.3.1 Transition BEC-BCS : théorie BCS	13
1.3.2 Limite d'attraction faible	16
1.3.3 Gaz dilué de bosons composites	16
1.3.4 Gaz unitaire	17
1.3.5 Expériences	18
1.4 Gaz de fermions polarisés	19
1.4.1 Limite de Clogston et Chandrasekhar	20
1.4.2 Expériences	21
1.4.3 Séparation de phases à l'unitarité	23
1.4.4 Diagramme de phases	25
1.4.5 Séparation de phases dans un potentiel harmonique	27
1.4.6 Le problème à N+1 corps	29
2 Le polaron : approche hamiltonienne	31
2.1 Ansatz variationnel : une paire particule-trou	31
2.1.1 L'Hamiltonien du système	31
2.1.2 Fonction d'onde et énergie de la quasi-particule	33

2.1.3	Résultats	35
2.1.4	Approximation q petit et comparaison aux calculs Monte-Carlo	37
2.1.5	Limite BCS et limite BEC	39
2.2	Un système exactement soluble : une impureté de masse infinie	41
2.2.1	Expression du potentiel chimique	41
2.2.2	Densité locale de l'espèce majoritaire	43
2.2.3	Comparaison avec l'ansatz variationnel	44
2.3	Traitement à N-corps complet	44
2.3.1	Fonction d'onde et projection de l'équation de Schrödinger	44
2.3.2	Découplage des équations	47
2.3.3	Résolution numérique	50
2.3.4	Résultats	51
3	Le problème à N+1 corps en dimension 1	55
3.1	Introduction	55
3.1.1	L'Hamiltonien du système	55
3.1.2	Réalisation expérimentale	57
3.1.3	Application du développement paires particule-trou	57
3.1.4	Limites de couplage faible et d'attraction forte	59
3.2	Le cas des masses égales : un système intégrable	60
3.2.1	Fonction d'onde de l'ansatz de Bethe	60
3.2.2	Calcul du potentiel chimique et de la masse effective	63
3.2.3	Fonction de corrélation de paire	66
3.2.4	Comparaison au développement paires particule-trou	68
3.3	L'impureté de masse infinie	71
3.3.1	Expression du potentiel chimique	71
3.3.2	Densité locale de l'espèce majoritaire	73
3.3.3	Comparaison au développement paires particule-trou	74
3.4	Étude du cas général	75
3.4.1	Résultats	76
3.4.2	Limite de répulsion forte	77
4	Introduction aux méthodes diagrammatiques	79
4.1	Propriétés générales des fonctions de Green	79
4.1.1	Définition	79
4.1.2	Représentation spectrale, propriétés analytiques	81
4.1.3	Relations entre G et les propriétés physiques du système	86
4.1.4	Fonction de Green à deux particules, équation de Dyson	87
4.1.5	Fonctions de Green à température finie	89
4.2	Développement diagrammatique	94
4.2.1	Représentation d'interaction	94
4.2.2	Théorème de Wick	95
4.2.3	Diagrammes de Feynman	96
4.2.4	Self-énergie, vertex, équation de Dyson	100
4.2.5	Limite thermodynamique	105

4.3	Quelques exemples simples	105
4.3.1	Le problème à deux corps	105
4.3.2	Le problème à trois corps	108
5	Description diagrammatique du polaron et de l'état lié	111
5.1	Polaron et état lié	111
5.1.1	Fonctions de Green	111
5.1.2	Calcul du potentiel chimique	112
5.1.3	Le polaron	113
5.1.4	L'état lié	114
5.1.5	Quelques remarques pratiques	115
5.2	L'approximation de la matrice T	116
5.2.1	Expression du vertex	116
5.2.2	Résultats	120
5.2.3	Limite BEC	122
5.2.4	Un traitement auto-cohérent	125
5.3	Généralisation à deux paires particule-trou	126
5.3.1	Expression du vertex	126
5.3.2	Intégration sur les fréquences	132
5.3.3	Énergie du polaron	134
5.3.4	Énergie de l'état lié	134
5.3.5	Résultats	136
5.3.6	Limite BEC	140
5.3.7	Généralisation à n paires particule-trou	144
	Conclusion et perspectives	147
A	Annexe : Fonctions de Green et diagrammes de Feynman	149
A.1	Potentiel thermodynamique de l'état fondamental	149
A.2	Excitations élémentaires et pôles de G	151
A.3	Théorème de Wick	152
A.4	Élimination des diagrammes non connexes	153
	Bibliographie	155
	Publications	163
	Résumé	184

Introduction

Cette thèse est consacrée à l'étude des gaz de fermions ultrafroids présentant un fort déséquilibre de population. Les postulats de la Mécanique Quantique ont été élaborés au cours des années 1922 à 1927, sous l'impulsion de plusieurs physiciens. Citons par exemple Bohr, Born, de Broglie, Dirac, Einstein, Heisenberg, Pauli, Schrödinger et Sommerfeld. L'existence de deux types de particules est alors découverte. Les bosons, de spin entier, sont régis par la statistique de Bose-Einstein et sont caractérisés par une fonction d'onde symétrique sous l'échange de deux particules. Les fermions, de spin demi-entier, sont quant à eux régis par la statistique de Fermi-Dirac et leur fonction d'onde est antisymétrique. Cette distinction, en apparence très simple, implique en réalité des comportements totalement différents, aussi bien à l'échelle microscopique qu'à l'échelle macroscopique. En effet, pour un système macroscopique à N-corps, lorsque la température est suffisamment basse, la longueur d'onde de de Broglie $\lambda_{dB} = h/\sqrt{2\pi mk_B T}$, représentant l'extension des fonctions d'onde, devient de l'ordre de la distance interparticule et la Mécanique Quantique commence à se manifester.

Ainsi, pour des fermions, il résulte de l'antisymétrie de la fonction d'onde le principe d'exclusion de Pauli : deux fermions identiques ne peuvent pas occuper le même état quantique. L'état fondamental d'un système de fermions sans interaction est donc obtenu en remplissant successivement les niveaux de plus basse énergie de l'Hamiltonien à un corps jusqu'à une énergie maximale appelée énergie de Fermi E_F : c'est la notion de mer de Fermi. De plus, pour des particules de spin 1/2, comme par exemple les électrons, chaque état peut contenir deux particules : un fermion de spin \uparrow et un fermion de spin \downarrow . Dans le cas d'un système homogène, l'énergie de Fermi est $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ où k_F est le vecteur d'onde du dernier état occupé et s'obtient à partir de la densité par spin $n = k_F^3 / 6\pi^2$. Naturellement, les phénomènes quantiques se manifestent alors si la température devient inférieure à la température de Fermi $T_F = E_F / k_B$, mais aucune transition de phase n'est présente.

Au contraire, pour un système de bosons, le passage dans le régime quantique s'accompagne d'une transition de phase où une fraction macroscopique des particules s'accumule dans le même état de plus basse énergie pour former un condensat de Bose-Einstein. La condensation de Bose-Einstein, qui a été prédite en 1924 par Einstein suite aux travaux de Bose, intervient lorsque la température devient inférieure à la température de condensation T_c , qui est une fonction croissante de la densité. Jusqu'en 1995, les condensats de Bose-Einstein n'existaient que dans des phases denses comme l'Hélium 4 superfluide. Cependant, le rôle complexe des interactions rend la compréhension de ces systèmes difficile et les gaz atomiques dilués de faible densité semblaient être de bien meilleurs candidats

pour l'étude des systèmes quantiques dégénérés. Le développement de ce domaine a été rendu possible grâce aux progrès remarquables accomplis dans les techniques de refroidissement laser. Ces progrès ont valu à leurs auteurs, S. Chu, C. Cohen-Tannoudji et W. Phillips, le prix Nobel de physique en 1997. Ils ont permis en 1995 l'obtention des premiers condensats de Bose-Einstein avec des gaz alcalins bosoniques dans l'équipe de C. Wieman et E. Cornell travaillant sur le rubidium, puis dans celle de W. Ketterle sur le sodium. Cette réalisation a également été récompensée en 2001 par le prix Nobel de physique. Ces condensats de Bose-Einstein ont été étudiés de façon très détaillée. En particulier, leurs propriétés de cohérence ont été remarquablement mises en évidence par des expériences d'interférences. La nature des excitations collectives a été très bien comprise, et leur comportement superfluide a été démontré par des mesures de vitesse critique et l'apparition de tourbillons quantifiés, les vortex, lorsque ces gaz sont mis en rotation.

Plus récemment, les gaz fermioniques ont largement pris le relais dans l'intérêt scientifique. L'une des motivations principales était d'aller au-delà de la physique du champ moyen qui décrit, via l'équation de Gross-Pitaevskii, la plupart des propriétés des condensats bosoniques. De façon générale, ces systèmes de gaz ultrafroids sont des systèmes modèles en interaction forte remarquables puisque leur analyse nécessite très peu de paramètres : la densité atomique et l'interaction atome-atome au travers de la longueur de diffusion a . Naturellement, la densité atomique peut être très facilement modifiée. Mais de manière très étonnante, il est également possible de changer la longueur de diffusion à l'aide d'un simple champ magnétique en utilisant le phénomène des résonances de Feshbach. Pour la valeur du champ correspondant à la résonance, la longueur de diffusion a diverge avec un changement de signe, et au voisinage elle prend des valeurs très grandes et rapidement variables en fonction du champ. La grande valeur de a , directement liée à la force effective de l'interaction, explique qu'on puisse être dans un régime d'interaction forte entre les atomes.

L'étude et la compréhension de ces systèmes modèles simples pourraient ainsi nous permettre une meilleure compréhension des systèmes en interaction forte de la matière condensée et en particulier de la supraconductivité à haute température critique. En effet, si on compare la température critique T_c à la température de Fermi T_F , nous avons pour des supraconducteurs usuels $T_c/T_F \sim 10^{-5} - 10^{-4}$, pour l'Hélium 3 $T_c/T_F \sim 5 \cdot 10^{-4}$ et pour des supraconducteurs à haute température critique $T_c/T_F \sim 10^{-2}$, alors que pour un gaz fermionique au voisinage d'une résonance de Feshbach le régime superfluide est atteint lorsque $T_c/T_F \sim 0.2$. Ces systèmes constituent donc, en un certain sens, des superfluides à très haute température critique. Indiquons que la limite unitaire, atteinte lorsque la longueur de diffusion devient supérieure à la distance interparticule, est aussi d'un grand intérêt en physique des particules, pour la matière de quarks, et en astrophysique pour ce qui concerne la nature du cœur des étoiles à neutrons. Par exemple, dans une étoile à neutrons, la longueur de diffusion neutron-neutron qui vaut environ -18.8 fm est grande par rapport à la distance entre neutrons d , puisque la densité est de l'ordre de 10^{38} cm^{-3} et $d \sim n^{-1/3} \sim 1$ fm. Il y a donc, de façon surprenante, des analogies entre la physique des étoiles à neutrons et les gaz dilués d'atomes ultrafroids à la limite unitaire dont la densité est de seulement $\sim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$.

Toutes les techniques expérimentales nécessaires pour la réalisation de ces gaz fermioniques ultrafroids avaient déjà été développées dans le contexte des condensats bosoniques. Ainsi, le régime de très basse température, où la dégénérescence quantique apparaît, a été rapidement atteint avec les isotopes fermioniques de deux alcalins, à savoir le ^6Li et le ^{40}K . La manifestation du principe d'exclusion de Pauli, par une répulsion effective entre atomes, a été observée. L'étude des résonances de Feshbach a ensuite été réalisée. Du côté de la résonance où la longueur de diffusion a est positive, il apparaît un état lié entre les atomes. En d'autres termes, il se forme des molécules, qui sont des bosons puisqu'elles sont composées de deux fermions. À basse température, ces bosons peuvent subir une condensation de Bose-Einstein (BEC) et former un superfluide analogue aux condensats bosoniques et à l'Hélium 4. La formation de ces molécules a été effectivement observée expérimentalement en 2003, suivie quelques mois plus tard de la condensation de Bose-Einstein correspondante. En variant le champ magnétique, il a alors été possible de passer continûment à travers la résonance de Feshbach pour obtenir un superfluide de type Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS), avec la formation de paires de Cooper analogues à celles qui existent dans les supraconducteurs. Ce fut la première réalisation expérimentale de la transition BEC-BCS dont l'étude théorique avait commencé dès les années 1980. La preuve de la superfluidité de ces systèmes tout au long de la transition a été à nouveau apportée grâce à l'observation de vortex, lorsque le gaz est mis en rotation.

Tout récemment l'étude des gaz fermioniques polarisés a vu un développement considérable. Il s'agit de la situation où les fermions appartenant à des états de spin différents sont en nombre inégal. En effet, précédemment nous avons considéré implicitement qu'ils étaient en nombre égal, ce qui permettait un appariement naturel en molécules ou en paires de Cooper. Dans le cas où ces nombres sont inégaux, le phénomène d'appariement va être perturbé, comme cela est déjà connu en supraconductivité où l'on pense qu'il peut apparaître des formes de supraconductivité non standard, appelées phases de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov. À la fin de l'année 2005, deux expériences similaires avec des gaz fermioniques polarisés ont ainsi confirmé l'existence d'une polarisation critique au-delà de laquelle la superfluidité disparaît. Cependant, dans les gaz froids la situation est notablement plus complexe que dans les supraconducteurs, car les interactions peuvent devenir très fortes et les théories de type champ moyen échouent dans la description quantitative du diagramme de phases. Il faut donc utiliser des techniques beaucoup plus évoluées prenant en compte les effets à N-corps.

Un cas extrême simple de gaz polarisé est celui d'un seul atome d'une espèce immergé dans une mer de Fermi d'une autre espèce d'atome. Bien que cette situation soit plus simple que celle de deux populations égales, elle est hautement non triviale, aussi bien dans le régime d'interaction forte lorsque la longueur de diffusion a diverge, que du côté BEC ($a > 0$) où on s'attend à un changement de la nature de la quasi-particule. Son étude constitue le cœur du sujet de cette thèse. Indiquons qu'il ne s'agit pas d'un problème purement théorique, puisqu'il intervient effectivement dans l'analyse des situations expérimentales et l'obtention du diagramme de phases. De plus, plusieurs expériences récentes au MIT et à l'ENS ont permis une vérification directe des résultats obtenus dans cette thèse. Enfin, nous nous plaçons dans le cadre général où les atomes des deux espèces peuvent avoir des masses différentes. En effet, cette situation sera d'un intérêt

expérimental grandissant au cours des toutes prochaines années puisque des expériences faisant intervenir un mélange de ${}^6\text{Li}$ et ${}^{40}\text{K}$ sont notamment en cours à Innsbruck et à Munich.

Ce mémoire est divisé en cinq chapitres.

Le chapitre 1 est une introduction aux gaz de fermions ultrafroids. Après avoir présenté les caractéristiques expérimentales des systèmes qui nous intéressent, nous effectuons quelques rappels de théorie de la diffusion, qui nous permettent de préciser la nature des interactions présentes à très basse température. Nous décrivons ensuite le comportement d'un gaz fermionique non polarisé tout au long de la transition BEC-BCS, à la fois sur le plan théorique et expérimental. Enfin, nous nous intéressons plus particulièrement à la situation du gaz polarisé et effectuons une présentation détaillée des études théoriques qui ont permis d'analyser les expériences et de préciser le diagramme de phases.

Les chapitres 2, 3 et 5 contiennent la partie originale de notre travail. Dans le chapitre 2, nous utilisons une approche hamiltonienne pour décrire le polaron, c'est-à-dire lorsque l'interaction n'est pas suffisamment forte pour produire un état lié. À l'aide d'un développement général de la fonction d'onde, nous avons ainsi pu comprendre les résultats obtenus par les approches précédentes et aboutir à une solution essentiellement exacte du problème.

Le chapitre 3 est consacré à l'étude de la dimension 1. Dans deux cas particuliers, il est alors possible d'obtenir la solution analytique de ce problème. Le très bon accord de nos résultats avec ces solutions exactes constitue une nouvelle confirmation de l'efficacité du développement que nous avons mis en place en dimension 3.

Les chapitres 4 et 5 utilisent le formalisme des diagrammes de Feynman. Le chapitre 4 est une introduction aux méthodes diagrammatiques. Il nous permet de présenter au lecteur non familier avec ce formalisme tous les outils qui nous seront nécessaires pour l'étude du problème à $N+1$ corps. Par souci à la fois de clarté et d'exhaustivité de l'exposé, les détails trop techniques sont donnés en annexe. Nous illustrons ces méthodes par l'étude du problème à deux et trois corps.

Dans le chapitre 5, nous utilisons une approche diagrammatique pour décrire à la fois le polaron et l'état lié. Pour le polaron, celle-ci se révèle être équivalente à l'approche hamiltonienne que nous avons présentée dans le chapitre 2. Pour l'état lié, nous montrons qu'elle fournit à nouveau une solution essentiellement exacte au problème. Cette étude nous permet également de préciser la transition polaron - état lié.

Gaz de fermions ultrafroids

Nous donnons dans ce chapitre une brève présentation des résultats théoriques et expérimentaux obtenus au cours des dix dernières années avec des gaz de fermions ultrafroids. Nous donnons dans un premier temps les propriétés physiques de ces systèmes. Nous effectuons ensuite quelques rappels de théorie de la diffusion qui nous permettent de préciser la nature des interactions à deux corps. Nous passons alors à l'étude de la transition BEC-BCS dans les gaz de fermions non polarisés. Nous en donnons une description simple à l'aide de la théorie BCS et précisons les différents régimes. La dernière section est consacrée aux gaz de fermions polarisés. Après avoir exposé les résultats des expériences du groupe de Hulet à l'Université Rice et du groupe de Ketterle au MIT, nous présentons en détail l'étude qui a permis d'obtenir le diagramme de phases. Enfin, nous passons en revue les différents travaux théoriques et expérimentaux sur le problème à $N+1$ corps.

1.1 Propriétés des gaz de fermions étudiés

1.1.1 États hyperfins des atomes alcalins

Les expériences que nous allons décrire utilisent des isotopes fermioniques d'alcalins. En effet, ces atomes présentent l'avantage d'avoir à la fois une structure électronique simple et d'être relativement facilement manipulables par laser, leur raie de résonance étant située dans le domaine de la lumière visible ou le proche infra-rouge. Les alcalins possèdent un unique électron de valence, le spin électronique vaut donc $S = 1/2$ et dans l'état fondamental le moment angulaire est $L = 0$, donc $J = 1/2$. Puisque leur numéro atomique est impair, les alcalins avec un nombre impair de nucléons (nombre pair de neutrons) sont des bosons alors que ceux ayant un nombre pair de nucléons (nombre impair de neutrons) sont des fermions. Ainsi ${}^6\text{Li}$ et ${}^{40}\text{K}$ sont des fermions, alors que ${}^1\text{H}$, ${}^{23}\text{Na}$, ${}^{85}\text{Rb}$ et ${}^{87}\text{Rb}$ sont des bosons.

Le spin nucléaire \mathbf{I} de ces atomes est couplé au spin électronique $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ par l'interaction hyperfine $V_{\text{hf}} = a_{\text{hf}} \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$ où a_{hf} est la constante hyperfine. En notant $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$ le spin total, cette interaction sépare donc l'état fondamental en deux sous-niveaux $F = I + 1/2$ et $F = I - 1/2$. Pour le ${}^{40}\text{K}$, on a $I = 4$, alors que pour ${}^6\text{Li}$, $I = 1$ et les

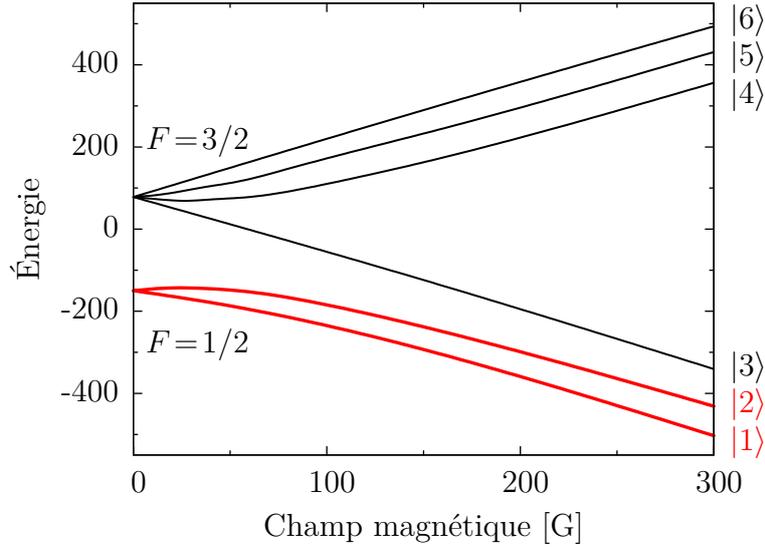


FIG. 1.1: Les six états hyperfins de ${}^6\text{Li}$ en fonction du champ magnétique correspondant à un spin nucléaire $I = 1$, un moment angulaire électronique $L = 0$ et un spin électronique $S = 1/2$. Dans les expériences actuelles, les deux états hyperfins les plus couramment utilisés sont $|1\rangle$ et $|2\rangle$ indiqués en rouge. Figure reproduite de [KZ08].

deux sous-niveaux sont représentés sur la figure 1.1. En présence d'un champ magnétique, l'effet Zeeman lève à nouveau la dégénérescence en $(2I + 1)(2S + 1) = 4I + 2$ états et à fort champ magnétique les bons nombres quantiques sont les projections m_I et m_S des spins nucléaire et électronique. Les six états hyperfins du ${}^6\text{Li}$ sont représentés sur la figure 1.1. La plupart des expériences réalisées avec cet alcalin utilisent les deux états de plus basse énergie $|1\rangle$ et $|2\rangle$ indiqués en rouge, à l'exception d'expériences récentes au MIT [SSSK08a, SWSZ09] qui utilisent $|1\rangle$ et $|3\rangle$ ou $|2\rangle$ et $|3\rangle$. Dans toute cette thèse, nous noterons ces deux états \uparrow et \downarrow , par analogie avec les deux états de spin d'un électron. Nous nous placerons de plus dans le cas général où la masse m_\uparrow peut être différente de m_\downarrow , correspondant à la situation où les deux états considérés sont des états hyperfins de deux atomes fermioniques différents, par exemple ${}^6\text{Li}$ et ${}^{40}\text{K}$.

1.1.2 Réalisation expérimentale

Les techniques de refroidissement et de piégeage pour atteindre le régime de dégénérescence quantique avec des fermions sont très similaires à celles utilisées pour l'obtention des condensats bosoniques. Nous renvoyons par exemple à [KZ08] pour une description détaillée. Les atomes, dont la température à la sortie du four est d'environ 700 K, sont d'abord refroidis par laser jusqu'à une température de l'ordre de 1 mK, puis transférés dans un piège magnéto-optique. Pour des bosons, l'étape suivante est alors le refroidissement évaporatif. Elle est basée sur des collisions élastiques qui produisent des atomes plus chauds qui s'échappent du piège et réduisent par la même occasion la température moyenne des atomes restants. Cependant, comme nous le verrons plus loin, il n'y a pas

d'interaction entre des fermions de même spin à très basse température. Cette technique est donc inefficace pour un gaz de fermions polarisé. Différentes solutions sont alors utilisées. Toutes font intervenir des collisions entre particules discernables. On peut par exemple utiliser une méthode de refroidissement sympathique à l'aide d'un mélange de bosons et de fermions, les bosons servant de réfrigérant. Il est ainsi possible d'atteindre des températures d'environ $T \sim 1 \text{ nK} - 1 \mu\text{K}$. Enfin, à l'aide d'une impulsion RF on peut alors transférer les atomes dans les deux états hyperfins considérés.

Après évaporation, on obtient un gaz métastable composé d'environ $N \sim 10^5 - 10^7$ atomes. Ces atomes sont piégés dans un potentiel harmonique anisotrope V_{trap} avec des fréquences longitudinale ω_z et transverse ω_{\perp} , qui satisfont approximativement $\omega_{\perp}/\omega_z \sim 5 - 50$. La taille longitudinale maximale du nuage est d'environ $\sim 100 \mu\text{m}$. La densité d'atomes est typiquement $n \sim 10^{12} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, correspondant à une distance entre particules $d \sim n^{-1/3} \sim 10^2 - 10^3 \text{ nm}$. Pour ces densités, la dégénérescence quantique donnée par la condition $\lambda_{\text{dB}} \gtrsim d$ est atteinte lorsque $T \sim 500 \text{ nK} - 50 \mu\text{K}$.

1.2 Interactions dans les gaz de fermions ultrafroids

1.2.1 Rappels de théorie de la diffusion

Considérons tout d'abord un système composé de deux particules discernables de masses m_{\uparrow} et m_{\downarrow} interagissant via le potentiel V dont nous supposons qu'il ne dépend que de la distance $|\mathbf{r}_{\uparrow} - \mathbf{r}_{\downarrow}|$. L'Hamiltonien s'écrit donc :

$$H = \frac{\mathbf{p}_{\uparrow}^2}{2m_{\uparrow}} + \frac{\mathbf{p}_{\downarrow}^2}{2m_{\downarrow}} + V(|\mathbf{r}_{\uparrow} - \mathbf{r}_{\downarrow}|). \quad (1.1)$$

Dans cette expression, nous pouvons séparer le mouvement du centre de masse du mouvement relatif en introduisant les variables $\mathbf{R} = (m_{\uparrow}\mathbf{r}_{\uparrow} + m_{\downarrow}\mathbf{r}_{\downarrow})/M$ et $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{\uparrow} - \mathbf{r}_{\downarrow}$ et les impulsions correspondantes :

$$\mathbf{P} = M\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{p}_{\uparrow} + \mathbf{p}_{\downarrow} \quad \text{et} \quad \mathbf{p} = m_r\dot{\mathbf{r}} = \frac{m_r}{m_{\uparrow}}\mathbf{p}_{\uparrow} - \frac{m_r}{m_{\downarrow}}\mathbf{p}_{\downarrow}, \quad (1.2)$$

où nous avons noté $M = m_{\uparrow} + m_{\downarrow}$ la masse totale et $m_r = m_{\uparrow}m_{\downarrow}/(m_{\uparrow} + m_{\downarrow})$ la masse réduite. Nous pouvons alors écrire $\mathbf{p}_{\uparrow} = \mathbf{p} + \gamma_{\uparrow}\mathbf{P}$ et $\mathbf{p}_{\downarrow} = -\mathbf{p} + \gamma_{\downarrow}\mathbf{P}$ avec $\gamma_{\uparrow} = m_{\downarrow}/M = 1 - \gamma_{\downarrow}$, et l'Hamiltonien devient :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_r} + V(r) = H_{\text{cm}} + H_{\text{rel}}. \quad (1.3)$$

Les états propres de l'Hamiltonien du centre de masse $H_{\text{cm}} = \mathbf{P}^2/2M$ sont des ondes planes de la variable \mathbf{R} , nous nous intéresserons donc à partir de maintenant uniquement à l'Hamiltonien H_{rel} . Plus précisément, nous cherchons ses états de diffusion solutions de l'équation de Schrödinger $H_{\text{rel}}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = E|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ avec une énergie $E = k^2/2m_r$ positive et

fixée (dans toute cette thèse nous prenons $\hbar = 1$) avec la condition aux limites :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad \text{pour } r \rightarrow \infty, \quad (1.4)$$

où le vecteur unitaire \mathbf{n} est défini par $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Le premier terme correspond ici à l'onde plane incidente et le deuxième à l'onde sphérique diffusée. Cette relation définit l'amplitude de diffusion $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$. La symétrie sphérique de l'Hamiltonien H_{rel} implique que $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$ ne dépend que de la norme de \mathbf{k} et de l'angle θ entre \mathbf{k} et \mathbf{n} . En particulier, dans la limite $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$, $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$ ne dépend pas de θ :

$$\lim_{k \rightarrow 0} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) \equiv -a, \quad (1.5)$$

et a est appelée *longueur de diffusion*.

• **Le formalisme de la matrice T .** — En introduisant une fonction de Green de l'opérateur $-\mathbf{p}^2/2m_r + E$ qui vérifie l'équation $(\Delta_{\mathbf{r}}/2m_r + E)G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$ [LL96] :

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | G | \mathbf{r}' \rangle = -\frac{m_r}{2\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = 2m_r \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2 - k'^2 + i\delta}, \quad (1.6)$$

où $\delta \rightarrow 0^+$, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + GV|\psi_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (1.7)$$

où nous avons noté $|\mathbf{k}\rangle$ l'onde plane $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ qui est dans le noyau de l'opérateur $\Delta_{\mathbf{r}}/2m_r + E$. En itérant formellement cette équation, nous obtenons :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + GV|\mathbf{k}\rangle + GVG|\mathbf{k}\rangle + GVG|\mathbf{k}\rangle + \dots \equiv |\mathbf{k}\rangle + GT|\mathbf{k}\rangle, \quad (1.8)$$

qui définit l'opérateur matrice T et permet d'obtenir une expression explicite pour $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ (si on suppose la matrice T connue). Remarquons que la définition de T implique immédiatement la relation $V|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = T|\mathbf{k}\rangle$. En projetant l'équation (1.8) sur $\langle \mathbf{r} |$, nous obtenons :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m_r}{2\pi} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \langle \mathbf{r}' | T | \mathbf{k} \rangle, \quad (1.9)$$

où nous avons utilisé l'expression de G donnée par l'équation (1.6). Dans la limite $r \rightarrow \infty$, nous pouvons ensuite identifier l'amplitude de diffusion en effectuant $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r$ dans le dénominateur et en utilisant le développement $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'$ dans l'exponentielle. Il vient :

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = -\frac{m_r}{2\pi} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \langle \mathbf{r}' | T | \mathbf{k} \rangle, \quad (1.10)$$

où nous avons noté $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}$. Cette équation s'écrit simplement :

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = -\frac{m_r}{2\pi} \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle, \quad (1.11)$$

elle permet d'obtenir l'amplitude de diffusion à l'aide de la seule connaissance de l'opérateur T . Remarquons que dans cette relation, nous avons $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$. Nous pouvons étendre la définition de f pour $|\mathbf{k}'| \neq |\mathbf{k}|$ en posant simplement :

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \equiv -\frac{m_r}{2\pi} \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle. \quad (1.12)$$

Nous allons maintenant obtenir une équation fermée pour l'opérateur T . En projetant la relation $V|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = T|\mathbf{k}\rangle$ sur $\langle \mathbf{k}'|$, nous obtenons :

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} V_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'} \langle \mathbf{q}' | \psi_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (1.13)$$

où nous avons noté $V_{\mathbf{q}}$ la transformée de Fourier de V définie par :

$$V_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}). \quad (1.14)$$

L'équation (1.13) montre que nous avons besoin de la transformée de Fourier de $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$. Celle-ci est obtenue en utilisant l'expression de G dans l'espace de Fourier (cf. équation (1.6)) :

$$G = 2m_r \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{|\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}|}{k^2 - q^2 + i\delta}, \quad (1.15)$$

et la relation $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + GT|\mathbf{k}\rangle$. Nous trouvons :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + 2m_r \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{q} | T | \mathbf{k} \rangle}{k^2 - q^2 + i\delta} |\mathbf{q}\rangle. \quad (1.16)$$

Ainsi, comme $\langle \mathbf{q}' | \mathbf{q} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}')$, la relation (1.13) nous donne une équation intégrale pour l'opérateur T :

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} + 2m_r \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{V_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \langle \mathbf{q} | T | \mathbf{k} \rangle}{k^2 - q^2 + i\delta}. \quad (1.17)$$

Indiquons qu'à la fin du chapitre 4, nous obtiendrons à nouveau cette équation à l'aide d'une approche purement diagrammatique. De manière générale, la résolution analytique de cette équation est impossible, puisqu'elle dépend de la structure complexe du potentiel d'interaction V . Une approximation souvent utilisée est l'approximation de Born. Elle consiste à négliger le terme intégral, c'est-à-dire à effectuer $\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle \approx V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$. Elle est donc naturellement valable dans la limite d'interaction faible.

• **Diffusion à basse énergie.** — Pour résoudre l'équation de Schrödinger, nous avons utilisé jusqu'ici l'espace de Fourier. À cause de la symétrie sphérique du potentiel, il est également judicieux d'étudier la fonction d'onde dans l'espace réel. Ainsi, en la décomposant sur les polynômes de Legendre :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) \frac{u_{kl}(r)}{r}, \quad (1.18)$$

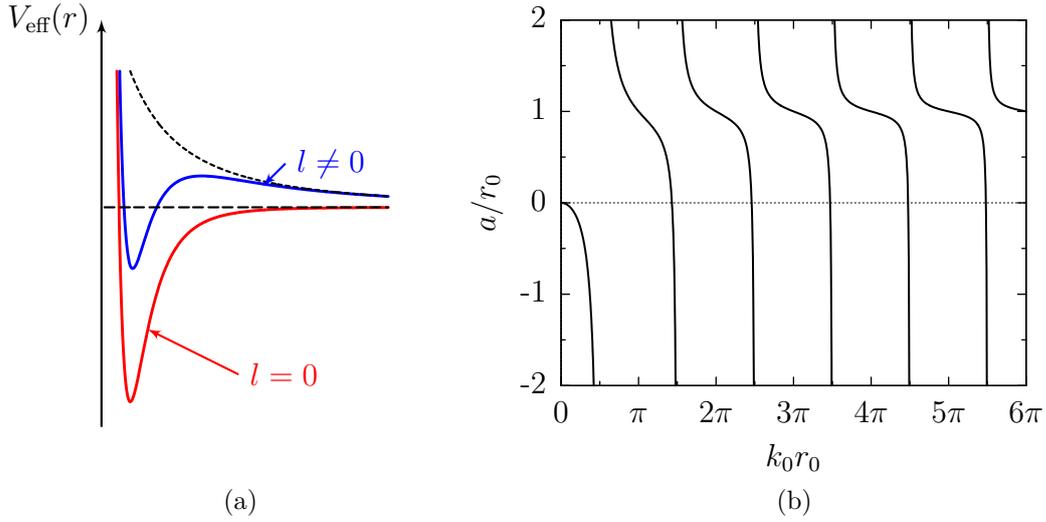


FIG. 1.2: (a) Représentation du potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + l(l+1)/(2m_r r^2)$ pour $l=0$ et $l \neq 0$. Lorsque $l \neq 0$ et $k \rightarrow 0$, la barrière centrifuge empêche la particule d'énergie $k^2/2m_r$ de sentir le potentiel à courte portée. (b) Longueur de diffusion a du puits carré en fonction de sa profondeur $k_0 = \sqrt{2m_r V_0}$ et de sa portée r_0 (cf. équation (1.22)).

où nous avons noté θ l'angle entre \mathbf{k} et \mathbf{r} , nous trouvons que les parties radiales $u_{kl}(r)$ sont solutions de l'équation :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2m_r V(r) \right] u_{kl}(r) = 0, \quad (1.19)$$

qui peut être interprétée comme une équation de Schrödinger à une dimension avec le potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + l(l+1)/(2m_r r^2)$, somme du potentiel d'interaction et du potentiel centrifuge, et que nous avons représenté sur la figure 1.2-(a). Puisque le système que nous considérons est à très basse température, nous nous intéressons uniquement à des énergies de collision très petites pour lesquelles $k \rightarrow 0$. Ainsi, nous voyons que pour $l \neq 0$ la particule fictive se déplaçant dans le potentiel $V_{\text{eff}}(r)$ ne sent pas le potentiel d'interaction $V(r)$ à courte portée, l'expression de $u_{kl}(r)$ est donc, en première approximation, la même que celle du problème libre. Nous en déduisons que la diffusion a lieu principalement en onde s ($l=0$). Plus précisément, on peut montrer que la composante d'indice l de l'amplitude de diffusion est d'ordre k^{2l} pour $k \rightarrow 0$ [LL96]. Par la suite, nous considérerons donc uniquement la diffusion en onde s .

Pour $l=0$, dans la limite $r \gg r_0$ où r_0 est la portée du potentiel, nous pouvons négliger V dans l'équation (1.19) et nous avons $u_{k0}(r) \propto \sin[kr + \delta_0(k)]$ où le déphasage $\delta_0(k)$ est donné par la résolution exacte de l'équation de Schrödinger et dépend de la structure du potentiel. En onde s , l'amplitude de diffusion ne dépend pas de l'angle θ et on montre qu'elle est donnée par [LL96] :

$$f_k = \frac{e^{2i\delta_0(k)} - 1}{2ik} = -\frac{1}{-k \cot \delta_0(k) + ik}. \quad (1.20)$$

En particulier, pour $k \rightarrow 0$, nous déduisons $-k \cot \delta_0(k) = a^{-1}$. Nous pouvons également tenir compte de la correction à l'ordre suivant $-k \cot \delta_0(k) = a^{-1} - r_e k^2/2$, où r_e est appelée portée effective. Nous obtenons alors l'expression usuelle de l'amplitude de diffusion en onde s à l'ordre 2 en k :

$$f_k = -\frac{1}{a^{-1} - \frac{1}{2}r_e k^2 + ik}. \quad (1.21)$$

• **Exemple du puits carré.** — Pour illustrer cette étude, nous considérons le cas du puits carré de portée r_0 et de profondeur V_0 défini par $V(\mathbf{r}) = -V_0$ (avec $V_0 > 0$) si $r \leq r_0$ et $V(\mathbf{r}) = 0$ si $r > r_0$. En notant $k_0 = \sqrt{2m_r V_0}$, la longueur de diffusion est alors donnée par [LL96] :

$$a = r_0 \left(1 - \frac{\tan(k_0 r_0)}{k_0 r_0} \right), \quad (1.22)$$

et la portée effective vaut $r_e = r_0 - r_0^3/(3a^2) - 1/(k_0^2 a)$. Ainsi, nous voyons que $r_e \simeq r_0$ sauf lorsque $|a| \ll r_0$. Nous représentons sur la figure 1.2-(b) la variation de a en fonction de r_0 . Nous observons que la longueur de diffusion diverge en changeant de signe lorsque $k_0 r_0 = \pi/2 + p\pi$ avec p entier. De plus, en étudiant les états liés de ce potentiel, on voit que chacune de ces valeurs correspond à l'apparition d'un nouvel état lié dans le puits.

• **Diffusion de particules indiscernables.** — Lorsque les deux particules sont indiscernables et sont des fermions, la fonction d'onde doit être antisymétrique sous l'échange de leur position. Nous en déduisons donc que $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ doit être une fonction impaire de \mathbf{r} . Ainsi, à la place du développement asymptotique (1.4), nous devons écrire :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + [f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) - f_{\mathbf{k}}(-\mathbf{n})] \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1.23)$$

Or, nous avons vu qu'à très basse température, dans l'amplitude de diffusion $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$, seule intervient la composante en onde s et celle-ci ne dépend que de la norme de \mathbf{k} (et pas de l'angle entre \mathbf{k} et \mathbf{n}). Le second membre de l'équation (1.23) est donc nul et il n'y a pas de diffusion en onde s entre deux particules indiscernables.

Ainsi, dans un gaz de fermions ultrafroids, il n'y a *pas d'interaction* effective entre deux atomes de même spin. Seule l'interaction entre deux atomes de spin différent est présente et celle-ci a lieu uniquement en onde s .

1.2.2 Modélisation de l'interaction

L'interaction entre deux atomes fermioniques de spin opposé peut être décrite par un potentiel de type Lennard-Jones. En pratique, puisque nous considérons des gaz dilués de fermions ultrafroids, la portée r_0 de ce potentiel ($r_0 \sim 50 a_0$ pour ${}^6\text{Li}$ avec a_0 le rayon de Bohr [KZ08]) est beaucoup plus petite que la longueur de de Broglie λ_{dB} et que la distance interparticule $n^{-1/3} \sim 5\,000 - 10\,000 a_0$. Nous pouvons donc le remplacer par un potentiel de contact $g\delta(\mathbf{r})$. Cependant, celui-ci est mal défini mathématiquement en dimension 3 à cause du comportement en $1/r$ des fonctions d'onde au voisinage de

l'origine. Pour le régulariser, nous introduisons une coupure k_c à grands vecteurs d'onde que nous ferons tendre vers l'infini et écrivons sa transformée de Fourier sous une forme séparable :

$$V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} = g \theta(k_c - k) \theta(k_c - k'), \quad (1.24)$$

où θ est la fonction de Heaviside et la constante de couplage g , qui dépend de k_c , est négative (potentiel attractif). On peut bien sûr utiliser d'autres méthodes de régularisation, mais elles conduisent toutes au même résultat physique. Celle que nous utilisons ici est particulièrement commode.

En insérant cette expression dans l'équation (1.17), nous déduisons que l'élément de matrice $\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle$ est nul pour $k' > k_c$ et indépendant de \mathbf{k}' pour $k' < k_c$. Ainsi, pour $k, k' < k_c$, nous avons :

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = g + 2m_r g \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\theta(k_c - q)}{k^2 - q^2 + i\delta}. \quad (1.25)$$

En divisant cette équation par $g \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle$ et en calculant l'intégrale, nous obtenons :

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle^{-1} = g^{-1} + \frac{m_r}{\pi^2} k_c + \frac{m_r k}{2\pi^2} \ln \left[\frac{k_c - k}{k_c + k} \right] + i \frac{m_r}{2\pi} k. \quad (1.26)$$

Cette expression ne dépend que de la norme du vecteur \mathbf{k} , nous trouvons donc naturellement que la diffusion associée au potentiel (1.24) a lieu uniquement en onde s . Plus précisément, en comparant ce résultat au développement de l'amplitude de diffusion pour $k \rightarrow 0$ (cf. équation (1.21)) :

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle^{-1} = -\frac{m_r}{2\pi} f(\mathbf{k}', \mathbf{k})^{-1} = \frac{m_r}{2\pi} \left[a^{-1} - \frac{1}{2} r_e k^2 + ik + o(k^2) \right], \quad (1.27)$$

nous obtenons les relations importantes :

$$\frac{m_r}{2\pi a} = g^{-1} + \frac{m_r}{\pi^2} k_c = g^{-1} + \sum^{k_c} \frac{2m_r}{k^2} \quad \text{et} \quad r_e = \frac{4}{\pi k_c}. \quad (1.28)$$

La deuxième relation montre que la limite $k_c \rightarrow \infty$ est équivalente à la limite de portée nulle. Elle attribue de plus un sens physique à la coupure k_c dont l'introduction pouvait paraître arbitraire, en montrant que celle-ci est fournie naturellement par la portée du potentiel réel. La première équation nous permet de relier la constante de couplage g à la longueur de diffusion physique a . Remarquons que dans la limite $k_c \rightarrow \infty$, la somme sur \mathbf{k} est divergente comme la plupart des sommes qui interviendront dans nos équations. Nous déduisons donc que, dans cette même limite, $g \rightarrow 0$. Plus précisément, en écrivant cette relation sous la forme :

$$\frac{2\pi a}{m_r} = g \left[1 + g \frac{m_r}{\pi^2} k_c \right]^{-1}, \quad (1.29)$$

nous déduisons que $g m_r k_c / \pi^2 \rightarrow -1^-$ si $a > 0$ et $g m_r k_c / \pi^2 \rightarrow -1^+$ si $a < 0$.

Nous pouvons également déterminer les états liés, s'ils existent, du potentiel (1.24).

Pour cela, nous devons résoudre l'équation de Schrödinger $H_{\text{rel}}|\varphi_b\rangle = E|\varphi_b\rangle$ avec une énergie E négative que nous écrivons $E = -\kappa^2/2m_r$. La projection de cette équation sur $\langle \mathbf{k} |$ nous donne :

$$(k^2 + \kappa^2)\langle \mathbf{k} | \varphi_b \rangle + 2m_r g \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \theta(k_c - k) \theta(k_c - q) \langle \mathbf{q} | \varphi_b \rangle = 0. \quad (1.30)$$

Nous déduisons alors immédiatement que pour $k > k_c$, $\langle \mathbf{k} | \varphi_b \rangle = 0$, et pour $k < k_c$:

$$\langle \mathbf{k} | \varphi_b \rangle = -\frac{2m_r g C}{k^2 + \kappa^2}, \quad \text{avec } C = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \theta(k_c - q) \langle \mathbf{q} | \varphi_b \rangle. \quad (1.31)$$

En remplaçant $\langle \mathbf{q} | \varphi_b \rangle$ par son expression dans la définition de C , nous obtenons l'équation :

$$1 = -2m_r g \left[\frac{k_c}{2\pi^2} - \frac{\kappa}{2\pi^2} \arctan(k_c/\kappa) \right]. \quad (1.32)$$

Enfin, en éliminant la constante de couplage g au profit de la longueur de diffusion a à l'aide de la relation (1.28), nous trouvons :

$$\frac{1}{a} = \frac{2}{\pi} \kappa \arctan(k_c/\kappa). \quad (1.33)$$

Cette équation n'a de solution que si $a > 0$ et dans la limite $k_c \rightarrow \infty$, nous avons alors simplement $\kappa = 1/a$, correspondant à $E = -\epsilon_b = -1/2m_r a^2$. Enfin, à l'aide de (1.31), nous obtenons l'expression usuelle de la fonction d'onde correspondante :

$$\varphi_b(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{e^{-r/a}}{r}. \quad (1.34)$$

1.2.3 Résonance de Feshbach

Un atout majeur des atomes ultrafroids provient de la possibilité de manipuler les interactions interatomiques, et donc la longueur de diffusion a , à l'aide d'un simple champ magnétique en utilisant le phénomène dit de résonance de Feshbach. Nous nous limiterons ici à une description qualitative qui nous permettra de comprendre l'origine physique de cette résonance. Nous renvoyons par exemple aux articles de revue [CGJT10, KZ08] qui présentent plusieurs modèles quantitatifs. Pour comprendre ce phénomène, il est nécessaire de prendre en compte la structure interne des deux atomes dont nous souhaitons décrire la collision. En effet, à cause de l'interaction hyperfine V_{hf} , le potentiel d'interaction dépend de l'orientation relative des spins des électrons de valence des deux atomes. Plus précisément, V_{hf} s'écrit :

$$V_{\text{hf}} = a_{\text{hf}}(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{i}_1 + \mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{i}_2), \quad (1.35)$$

où a_{hf} est la constante hyperfine, $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ les spins électroniques et $\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2$ les spins nucléaires des deux atomes. Comme cette expression n'est pas diagonale en fonction du spin total $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$, elle couple les états singulets et triplets. Nous supposons par exemple que

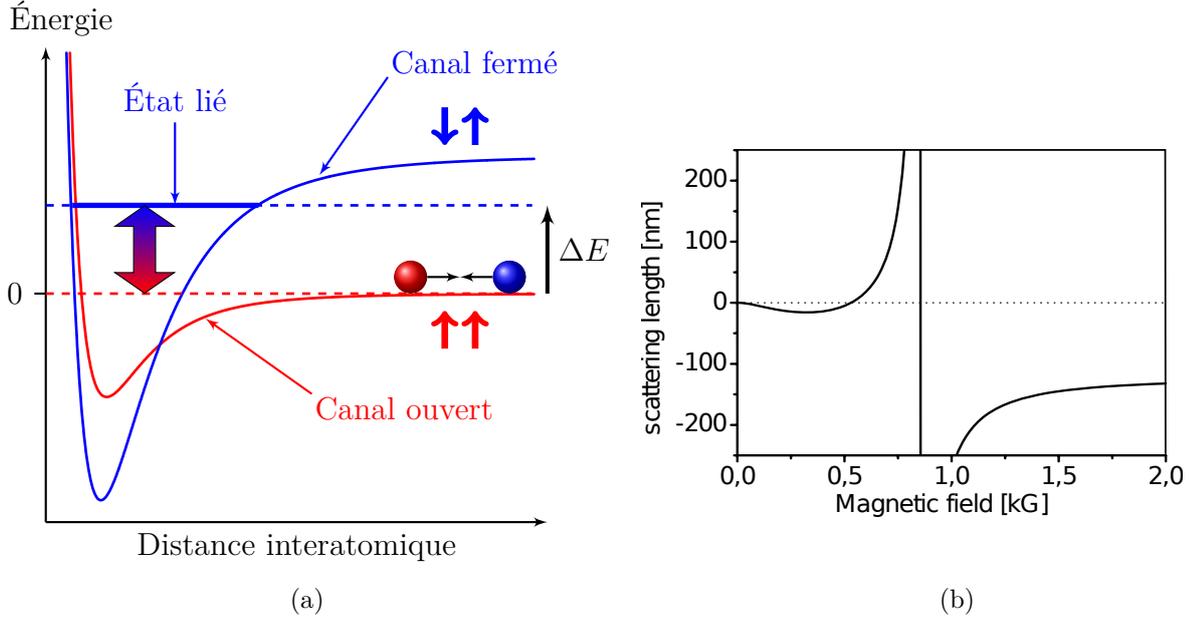


FIG. 1.3: (a) Représentation schématique du mécanisme à l'origine d'une résonance de Feshbach. À l'aide d'un champ magnétique, l'énergie de l'état lié du canal fermé peut être amenée en résonance avec l'énergie de collision des deux atomes dans le canal ouvert. (b) Résonance de Feshbach entre les deux états hyperfins de plus basse énergie du ${}^6\text{Li}$ [BCK+03].

les deux atomes entrant en collision sont dans un état triplet, comme représenté sur la figure 1.3-(a), et notons $V_T(r)$ le potentiel décrivant l'interaction entre ces deux atomes en l'absence de couplage hyperfin. De même, nous notons $V_S(r)$ le potentiel associé à un état singulet. Ces deux courbes de potentiel peuvent être relativement différentes comme c'est le cas sur la figure 1.3-(a). Nous prenons pour origine des énergies le seuil de dissociation du potentiel $V_T(r)$ que nous appelons canal ouvert. Puisque les deux atomes sont à très basse température, leur énergie de collision E est très petite $E \simeq 0$. À cette énergie, le potentiel $V_S(r)$ n'a pas d'état de diffusion accessible. Par conservation de l'énergie, après la collision les deux atomes ne peuvent donc pas être dans l'état singulet, nous appelons le potentiel $V_S(r)$ canal fermé.

Une résonance de Feshbach se produit lorsqu'un état lié du canal fermé devient quasi-résonnant avec l'énergie des atomes incidents dans le canal ouvert. En effet, au moment de la collision, les deux atomes peuvent alors effectuer une transition virtuelle vers cet état lié puis revenir dans le canal ouvert. La durée de cette transition est $\tau \sim \hbar/|\Delta E|$ où $\Delta E = E_b - E$ est la différence entre l'énergie de l'état lié du canal fermé et l'énergie des deux atomes du canal ouvert. En particulier, au voisinage de la résonance $E \simeq E_b$, cette transition peut durer relativement longtemps. On peut montrer [KZ08] que la longueur de diffusion est alors donnée par $a \propto -1/\Delta E$ et diverge donc en changeant de signe lorsque $E = E_b$. Ainsi, lorsque $E_b < E$, on a un réel état lié et la longueur de diffusion a est positive, alors que pour $E_b > E$, l'état lié est seulement virtuel (avec une énergie supérieure à l'énergie de collision) et a est négative. La situation est donc tout à fait analogue à celle du puits carré que nous avons représentée sur la figure 1.2-(b). Enfin, puisque la configuration électronique des deux canaux est différente, leur moment

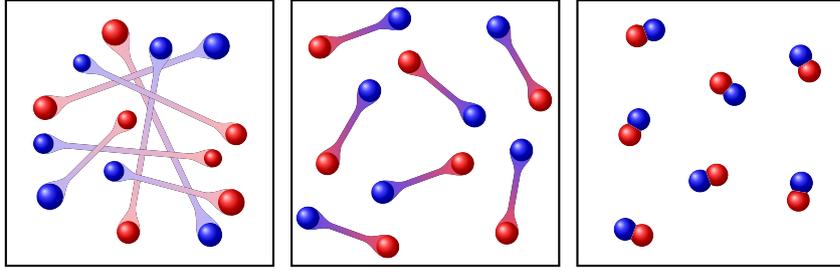


FIG. 1.4: Représentation schématique de la transition BEC-BCS. En faisant varier la longueur de diffusion décrivant l'interaction entre deux atomes fermioniques, on passe d'un régime de paires de Cooper $1/k_F a \ll -1$ (à gauche) à un régime de molécules fortement liées $1/k_F a \gg 1$ (à droite). Entre ces deux limites, il existe un régime intermédiaire pour lequel la taille des paires est comparable à la distance interparticule. Figure reproduite de [KZ08].

magnétique est différent. Ainsi, en présence d'un champ magnétique, l'effet Zeeman pour les deux canaux est différent. Si on note $\Delta\mu$ la différence de moment magnétique entre le canal ouvert et le canal fermé, nous avons $\Delta E = \Delta\mu(B - B_0)$ où B_0 est le champ magnétique à la résonance. En tenant compte de la longueur de diffusion de fond a_{bg} décrivant les collisions dans le canal ouvert en dehors de la résonance, nous pouvons alors écrire a sous sa forme phénoménologique usuelle :

$$a(B) = a_{\text{bg}} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (1.36)$$

Par exemple, pour le ^6Li , la résonance couramment utilisée se situe à $B_0 \simeq 834 \text{ G}$ avec $a_{\text{bg}} \simeq -1\,405 a_0$ (où a_0 est le rayon de Bohr) et $\Delta B \simeq -300 \text{ G}$ [BAR⁺05], alors que pour le ^{40}K il s'agit de la résonance à $B_0 \simeq 202 \text{ G}$. Dans les deux cas, nous avons $\Delta\mu > 0$, donc $\Delta E < 0$ si $B < B_0$: il y a un réel état lié avant la résonance et a est alors positive. Ainsi, comme nous pouvons le voir sur la figure 1.3-(b), il est possible de faire varier fortement la longueur de diffusion à l'aide d'un simple champ magnétique. En pratique, pour les résonances assez larges utilisées dans les expériences, on peut oublier le canal fermé et considérer uniquement le canal ouvert avec une longueur de diffusion qui dépend du champ magnétique [Com03].

Revenons maintenant sur les propriétés d'un gaz de fermions ultrafroids. Comme nous l'avons vu au début de cette section, des atomes fermioniques préparés dans le même état hyperfin n'interagissent pas à très basse température. Par contre, si nous considérons un système composé d'un mélange de deux états hyperfins, les atomes dans des états différents peuvent interagir et une mesure de cette interaction est donnée par le produit $k_F a$. L'utilisation des résonances de Feshbach a donc ouvert la possibilité d'explorer, avec le même système, la transition entre deux régimes a priori totalement différents. Lorsque la longueur de diffusion a est négative et $1/k_F a \ll -1$, l'attraction entre les atomes est faible, ils forment des paires dont la taille est grande devant la distance moyenne entre particules et la superfluidité est de type BCS (du nom de ses inventeurs Bardeen, Cooper et Schrieffer [BCS57]) analogue à celle des supraconducteurs. Ces paires de Cooper sont

cependant radicalement différentes des molécules usuelles : l'appariement ne résulte pas simplement de l'interaction des deux particules constitutives de la paire, mais implique la mer de Fermi dans son ensemble. Ce caractère collectif se manifeste de deux façons : les deux particules sont très éloignées l'une de l'autre et l'énergie de liaison de la paire dépend explicitement de la densité de particules. Une des conséquences fondamentales de cette origine collective est que les paires de Cooper apparaissent à la même température que l'ordre quantique et cette température est très inférieure à T_F . C'est le régime BCS représenté sur la gauche de la figure 1.4. Inversement, lorsque la longueur de diffusion a est positive, nous avons vu qu'il y a formation d'un état lié. La taille de ces molécules qui, composées de deux fermions, sont des bosons, est de l'ordre de $1/a$. En particulier, dans la limite diluée $1/k_F a \gg 1$, ces bosons composites sont fortement liés et, en dessous d'une température critique de l'ordre de T_F , ils forment un condensat de Bose-Einstein (BEC). Contrairement au cas $a < 0$, les molécules apparaissent ici avant l'ordre quantique. C'est le régime BEC représenté sur la droite de la figure 1.4. Entre ces deux régimes, la taille des paires est comparable à la distance interparticule et la description quantitative du système est beaucoup plus difficile.

1.2.4 Approximation de densité locale

Comme nous le verrons plus loin, les études théoriques sont souvent réalisées avec des systèmes homogènes, c'est-à-dire sans le potentiel de piégeage V_{trap} . Elles permettent en général d'obtenir l'équation d'état reliant l'énergie E à la densité n . L'approximation de densité locale consiste à supposer que localement dans le piège le système se comporte comme un gaz uniforme. Son énergie dans l'ensemble grand canonique s'écrit donc :

$$E = \int \left\{ e[n_\sigma(\mathbf{r})] + V_{\text{trap}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) - \mu_\downarrow^0 n_\downarrow(\mathbf{r}) - \mu_\uparrow^0 n_\uparrow(\mathbf{r}) \right\} d\mathbf{r}, \quad (1.37)$$

où nous avons noté $e(n_\sigma)$ la densité d'énergie, $n(\mathbf{r}) = n_\downarrow(\mathbf{r}) + n_\uparrow(\mathbf{r})$ la densité totale et $\mu_\uparrow^0, \mu_\downarrow^0$ sont les multiplicateurs de Lagrange introduits pour assurer la conservation du nombre de particules $\int n_\sigma(\mathbf{r})d\mathbf{r} = N_\sigma$. Le deuxième terme correspond ici à l'énergie à un corps due au potentiel de piégeage et nous avons supposé qu'il est le même pour les deux espèces. Indiquons que cette approximation est naturellement exacte dans la limite du piège très étendu. À l'équilibre, nous avons $\delta E/\delta n_\sigma(\mathbf{r}) = 0$, et en utilisant la relation $\partial e/\partial n_\sigma = \mu_\sigma$, nous déduisons :

$$\mu_\sigma^0 = \mu_\sigma[n_\sigma(\mathbf{r})] + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}). \quad (1.38)$$

Dans cette équation, $\mu_\sigma[n_\sigma(\mathbf{r})]$ est le potentiel chimique local obtenu à partir de l'équation d'état pour un système homogène. Si nous supposons que $V_{\text{trap}}(\mathbf{0}) = 0$, μ_σ^0 s'identifie avec le potentiel chimique au centre du piège. Il est déterminé par la condition de normalisation $\int n_\sigma(\mathbf{r})d\mathbf{r} = N_\sigma$. En pratique, cette équation est utilisée pour obtenir la densité $n_\sigma(\mathbf{r})$ des atomes dans le piège. Voyons comment ce faire sur l'exemple du gaz idéal de fermions sans interaction. L'équation d'état nous donne alors simplement :

$$\mu_\sigma(n_\sigma) = \frac{(6\pi^2 n_\sigma)^{2/3}}{2m}. \quad (1.39)$$

En inversant cette relation pour obtenir n_σ en fonction de μ_σ et en utilisant l'équation (1.38), nous en déduisons :

$$n_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{(2m)^{3/2}}{6\pi^2} \left[\mu_\sigma^0 - V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \right]^{3/2}, \quad (1.40)$$

tant que $V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \leq \mu_\sigma^0$. Pour simplifier, nous supposons que le potentiel harmonique de piégeage est isotrope $V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) = (1/2)m\omega^2 r^2$. La contrainte de normalisation $\int n_\sigma(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N_\sigma$, nous permet alors d'obtenir $\mu_\sigma^0 = \omega(6N_\sigma)^{1/3}$, ainsi que le rayon du nuage atomique (défini par la condition $n_\sigma(r=R_\sigma^0) = 0$) :

$$R_\sigma^0 = a_{\text{oh}}(48N_\sigma)^{1/6}, \quad (1.41)$$

où nous avons noté $a_{\text{oh}} = 1/\sqrt{m\omega}$ la longueur caractéristique de l'oscillateur harmonique. Nous pouvons alors écrire la densité $n_\sigma(\mathbf{r})$ sous la forme usuelle :

$$n_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{8N_\sigma}{\pi^2(R_\sigma^0)^3} \left[1 - \left(\frac{r}{R_\sigma^0} \right)^2 \right]^{3/2}. \quad (1.42)$$

Expérimentalement, cette densité peut être mesurée par des techniques d'imagerie in situ. Indiquons qu'il est également possible d'accéder à la distribution en impulsion à l'aide d'une mesure de temps de vol, qui consiste à éteindre le potentiel de piégeage et à mesurer la distribution en position après expansion du nuage.

1.3 Gaz de fermions non polarisés

1.3.1 Transition BEC-BCS : théorie BCS

La possibilité de pouvoir modifier l'interaction dans un gaz de fermions ultrafroids à l'aide d'un simple champ magnétique a rendu possible la première réalisation expérimentale de la transition BEC-BCS. En effet, en dehors des deux limites de couplage faible $a \rightarrow 0^-$ (BCS) et d'attraction forte $a \rightarrow 0^+$ (BEC), il n'existe pas de solution exacte du problème à N-corps et la nature de la transition entre ces deux limites est restée pendant longtemps inconnue. Une théorie de champ moyen qui se révèle à la fois simple et qualitativement correcte a été introduite par Leggett [Leg80] dans le contexte des gaz de fermions ultrafroids à température nulle (elle avait déjà été utilisée phénoménologiquement par Eagles [Eag69] pour explorer la supraconductivité dans les semi-conducteurs), puis à $T \neq 0$ par Nozières et Schmitt-Rink [NSR85] et Sá de Melo *et al.* [SdMRE93]. Elle consiste à généraliser la théorie BCS [BCS57] de la supraconductivité au-delà de la zone d'interaction faible $a \rightarrow 0^-$. Nous considérons donc l'Hamiltonien BCS (qui revient à effectuer l'approximation $\mathbf{P} = \mathbf{k}$, $\mathbf{P}' = \mathbf{k}'$ dans l'expression générale (2.6) que nous utiliserons par la suite) :

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_k c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + g \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad (1.43)$$

où nous avons noté $\epsilon_k = k^2/2m$, et la fonction d'onde BCS :

$$|\psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_k + v_k c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |vac\rangle, \quad (1.44)$$

qui décrit la création de paires de Cooper d'impulsion totale nulle. Dans cette expression, les coefficients u_k peuvent être choisis réels et positifs (quitte à multiplier la fonction d'onde par un facteur de phase). Le calcul de l'énergie dans l'ensemble grand canonique nous donne alors :

$$\langle H_{\text{BCS}} - \mu N \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_k |v_k|^2 + g \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_k^* v_k u_{k'} v_{k'}^*, \quad (1.45)$$

où nous avons noté $\xi_k = \epsilon_k - \mu$. La minimisation de cette énergie en fonction des paramètres u_k et v_k montre que les v_k sont également réels positifs, et en définissant :

$$\Delta \equiv -g \sum_{\mathbf{k}} u_k v_k = -g \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle, \quad E_k \equiv \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}, \quad (1.46)$$

nous trouvons :

$$u_k v_k = \frac{\Delta}{2E_k}, \quad u_k^2 = 1 - v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right). \quad (1.47)$$

En sommant la première relation sur k et en éliminant la constante de couplage g au profit de la longueur de diffusion a à l'aide de la relation (1.28), nous trouvons l'équation du gap :

$$\frac{m}{4\pi a} = \sum_k \left(\frac{1}{2\epsilon_k} - \frac{1}{2E_k} \right). \quad (1.48)$$

Nous obtenons une deuxième équation (qui est inutile dans la théorie BCS usuelle) à l'aide de la conservation du nombre de particules. En effet, la valeur moyenne du nombre d'occupation est $n_{\mathbf{k}\sigma} = \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = v_k^2$, nous avons donc :

$$n_\sigma \equiv \frac{k_F^3}{6\pi^2} = \frac{1}{2} \sum_k \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right). \quad (1.49)$$

Ces deux équations sont des équations couplées pour le potentiel chimique μ et le gap Δ . La résolution numérique de ce système ne pose aucune difficulté. Nous représentons les résultats sur la figure 1.5. Nous observons que μ et Δ sont des fonctions totalement régulières tout au long de la transition reliant les deux régimes BCS $1/k_F a \rightarrow -\infty$ et BEC $1/k_F a \rightarrow +\infty$. En particulier, lorsque la longueur de diffusion diverge à l'unitarité, il n'y a aucune singularité. Les différents cas limites seront étudiés dans les prochaines sections.

Indiquons que cette théorie est équivalente à une théorie de champ moyen (en négligeant le terme de Hartree) qui permet d'écrire l'Hamiltonien sous une forme quadratique en les opérateurs $c_{\mathbf{k}\sigma}$ et $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$. À l'aide d'une transformation de Bogoliubov, il est alors possible de le diagonaliser et d'interpréter E_k comme l'énergie des quasi-particules. De

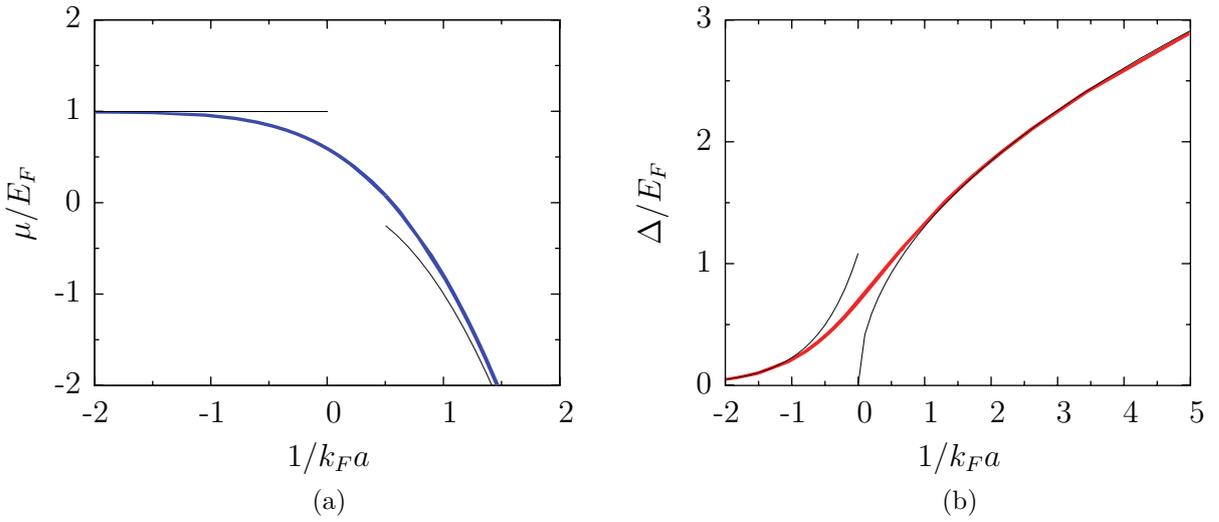


FIG. 1.5: Potentiel chimique μ (a) et gap Δ (b) donnés par la théorie BCS en fonction de $1/k_F a$. Les courbes en noir correspondent aux développements asymptotiques dans la limite BCS (cf. section 1.3.2) et dans la limite BEC (cf. section 1.3.3).

plus, l'énergie de l'état fondamental $E = \langle H_{\text{BCS}} \rangle$ est donnée par :

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \left(2\epsilon_k v_k^2 - \frac{\Delta^2}{2E_k} \right). \quad (1.50)$$

Nous pouvons naturellement nous interroger sur la validité de la théorie BCS lorsque l'interaction devient de plus en plus forte. Pour cela, nous allons préciser la structure de la fonction d'onde BCS (1.44). Remarquons tout d'abord que nous nous sommes placés dans l'ensemble grand canonique et que cette fonction d'onde n'est pas vecteur propre de l'opérateur nombre de particules. Plus précisément, en développant le produit, nous pouvons l'écrire comme une somme d'états ayant un nombre pair de particules :

$$|\psi_{\text{BCS}}\rangle \propto |vac\rangle + b^\dagger |vac\rangle + \frac{1}{2}(b^\dagger)^2 |vac\rangle + \dots \quad (1.51)$$

où $b^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} v_k/u_k c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ est l'opérateur de création de paire. Ainsi, la projection de la fonction d'onde (1.44) sur le sous-espace à N particules est $|\psi_{\text{BCS}}\rangle_N \propto (b^\dagger)^{N/2} |vac\rangle$ qui s'écrit dans l'espace réel :

$$\psi_{\text{BCS}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = A[\phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \dots \phi(\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N)], \quad (1.52)$$

où A est l'opérateur d'antisymétrisation, les coordonnées \mathbf{r}_i avec i pair correspondent par exemple aux particules \uparrow et celles avec i impair aux particules \downarrow . Nous avons noté $\phi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k}/(2\pi)^3 v_k/u_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ la fonction d'onde de paire. En particulier, dans la limite BEC nous pouvons montrer que $\phi(\mathbf{r})$ est simplement la fonction d'onde de l'état lié $\varphi_b(\mathbf{r})$ donnée par l'équation (1.34) [Pop66, KK68]. La fonction d'onde à N -corps (1.52) correspond alors à un système où tous les atomes sont appariés en molécules, elle est

donc bien adaptée au condensat de bosons composites que nous attendons dans cette limite.

Ainsi, il semblait raisonnable de penser que cette théorie introduite par Leggett, Nozières et Schmitt-Rink dans les années 1980, décrit au moins de manière qualitative le système tout au long de la transition BEC-BCS, et que cette transition est donc continue. Cependant, les systèmes expérimentaux alors disponibles ne permettaient pas de vérifier cette prédiction. Cela a été rendu possible à l'aide des progrès récents réalisés dans le domaine des gaz ultrafroids et l'utilisation des résonances de Feshbach. Nous nous intéressons maintenant plus particulièrement aux 3 cas limites $1/k_F a \rightarrow -\infty$, $1/k_F a \rightarrow +\infty$ et $1/k_F a = 0$, en comparant les résultats donnés par les différentes théories. Nous renvoyons par exemple à l'article de revue [GPS08] pour une étude plus détaillée.

1.3.2 Limite d'attraction faible

Dans la limite de couplage faible $a \rightarrow 0^-$, les équations de la théorie BCS (1.48) et (1.49) montrent que nous avons alors naturellement $\mu \rightarrow E_F$, $\Delta \rightarrow 0$, $n_{\mathbf{k}\sigma} = \theta(k_F - k)$ et l'énergie totale est l'énergie d'une mer de Fermi sans interaction $E \simeq (3/5)NE_F$. Plus précisément, nous avons :

$$\Delta_{\text{BCS}} = \frac{8}{e^2} E_F e^{-\pi/2k_F|a|} \simeq 1.08 E_F e^{-\pi/2k_F|a|}. \quad (1.53)$$

Indiquons que même dans cette limite de couplage faible, ce résultat de type champ moyen n'est pas exact. La solution exacte doit prendre en compte la modification de l'interaction par le milieu et a été obtenue par Gorkov et Melik-Barkhudarov [GMB61] à l'aide d'une théorie diagrammatique. Ils ont obtenu :

$$\Delta = \left(\frac{2}{e}\right)^{7/3} E_F e^{-\pi/(2k_F|a|)} \simeq 0.49 T_F e^{-\pi/2k_F|a|}, \quad (1.54)$$

c'est-à-dire environ deux fois moins que le résultat donné par la théorie BCS simpliste. Il en est de même pour la température critique. En prenant en compte la correction de Gorkov et Melik-Barkhudarov, il vient :

$$T_c = \left(\frac{2}{e}\right)^{7/3} \frac{\gamma}{\pi} T_F e^{\pi/(2k_F a)} \simeq 0.28 T_F e^{-\pi/2k_F|a|}, \quad (1.55)$$

où $\gamma = e^C \simeq 1.781$ et C est la constante d'Euler $C \simeq 0.577$. Ainsi, $T_c \ll T_F$ dans la limite BCS rendant très difficile l'observation de la transition superfluide dans les gaz dilués. Par exemple, pour $1/k_F a = -5$, nous trouvons $T_c \sim 10^{-4} T_F$.

1.3.3 Gaz dilué de bosons composites

Dans la limite BEC $a \rightarrow 0^+$, les équations de la théorie BCS (1.48) et (1.49) donne $\mu = -\epsilon_b/2$ où $\epsilon_b = 1/2m_r a^2$ est l'énergie de liaison de l'état lié et $\Delta \simeq \sqrt{16/(3\pi)} E_F / \sqrt{k_F a} \ll |\mu|$. Ainsi, le potentiel chimique μ passe d'une valeur positive $\mu = E_F$ dans la limite BCS à une valeur très négative dans la limite BEC, il change donc de signe entre ces

deux régimes. Plus précisément, cela se produit pour $1/k_F a \simeq 0.553$ et correspond à un changement qualitatif du spectre des quasi-particules, puisque le minimum de E_k n'est alors plus atteint en $k = k_F$ mais en $k = 0$. À l'aide de l'équation (1.50), nous pouvons également calculer l'énergie totale du système dans cette limite :

$$\frac{E}{N} = -\frac{\epsilon_b}{2} + \frac{k_F a}{3\pi} E_F + o(k_F a). \quad (1.56)$$

Le terme linéaire en a décrit au niveau champ moyen l'interaction entre $N/2$ dimères de masse $2m$ dont la constante de couplage $g_B = 2\pi a_B/m$ fait intervenir la longueur de diffusion dimère-dimère. Le résultat de la théorie BCS correspond à $a_B = 2a$, alors que la valeur exacte est $a_B = 0.6a$ [PSS04, BKK⁺06]. Les corrections d'ordre supérieur sont données par un développement de type Lee, Huang et Yang [LHY57]. Leyronas et Combescot [LC07] ont montré que jusqu'à l'ordre $5/2$ en $k_F a$ la nature composite des bosons ne se manifeste pas, l'énergie est celle d'un gaz de bosons dilués de masse $2m$ et de longueur de diffusion a_B :

$$\frac{E}{N} = -\frac{\epsilon_b}{2} + \frac{k_F a_B}{6\pi} \left[1 + \frac{128}{15\sqrt{6}\pi^3} (k_F a_B)^{3/2} \right] E_F + o(k_F a)^{5/2}. \quad (1.57)$$

La température critique est également analogue à celle d'un gaz de bosons. Dans le cas uniforme, elle est donnée par la formule usuelle [PS01] $T_c = (2\pi/k_B m)(n_\sigma/\zeta(3/2))^{2/3} \simeq 0.218 T_F$. Ainsi, contrairement au régime BCS, la transition superfluide se produit pour une température critique de l'ordre de la température de Fermi. Indiquons que la théorie BCS fournit une température critique proportionnelle à ϵ_b , puisqu'elle correspond en fait à la température de dissociation de paires, et non à la température de condensation.

Enfin, précisons qu'il existe en fait deux régimes différents correspondant à une longueur de diffusion positive $a > 0$: ils sont associés à deux branches différentes de l'énergie [PC04]. Le premier correspond à la situation que nous avons décrite ici, c'est le seul que nous considérerons par la suite. Expérimentalement, ce régime est atteint en partant d'une longueur de diffusion négative et en traversant adiabatiquement la résonance jusqu'à $a > 0$. L'autre possibilité consiste à amener adiabatiquement un gaz d'atomes sans interaction ($a = 0$) dans une configuration $a > 0$ à l'aide d'une rampe de champ magnétique et en restant suffisamment loin de la résonance. L'interaction effective est alors répulsive et dans la limite $a \rightarrow 0^+$, nous avons un gaz dilué de fermions qui reste normal jusqu'à très basse température.

1.3.4 Gaz unitaire

Nous nous intéressons maintenant à la situation où l'interaction devient très forte au voisinage de la résonance $k_F |a| \gtrsim 1$. Il s'agit d'un problème beaucoup plus difficile que les régimes BCS et BEC que nous avons présentés précédemment. La longueur de diffusion est alors plus grande que la distance interparticule (qui est supposée beaucoup plus grande que la portée du potentiel d'interaction à deux corps). Ce régime correspond donc à la situation inhabituelle d'un gaz qui est à la fois dilué ($nr_0^3 \ll 1$) et en interaction forte ($na^3 \gg 1$). Il n'existe pour le moment aucune solution exacte de ce problème à N-corps,

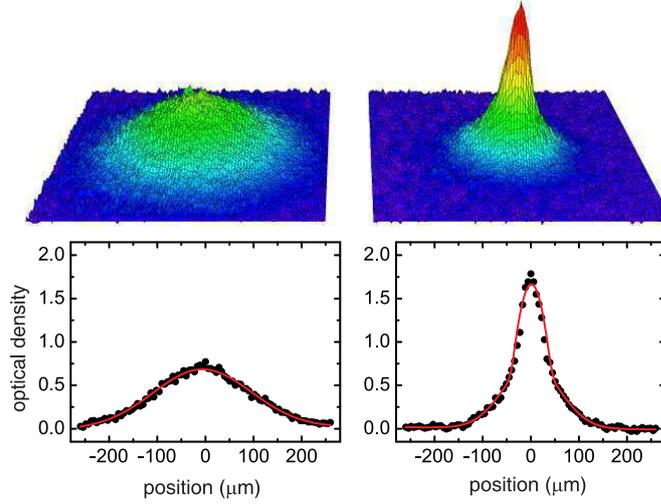


FIG. 1.6: Images de temps de vol de molécules de ^{40}K [GRJ03]. Les images de gauche correspondent à une température $0.19 T_F = 250 \text{ nK}$ au-dessus de la température critique de condensation T_c (la fraction condensée est nulle) alors que les images de droite correspondent à une température $0.06 T_F = 79 \text{ nK}$ inférieure à T_c avec une fraction condensée de 12%. Le nombre de molécules est d'environ $2 \cdot 10^5$.

nous devons donc utiliser des théories approchées ou des simulations numériques. La limite $k_F|a| \rightarrow \infty$ est appelée unitarité et l'amplitude de diffusion est alors universelle $f(k) = i/k$. Puisque la longueur de diffusion n'intervient plus, la seule longueur caractéristique du problème est $1/k_F$ et la seule énergie est l'énergie de Fermi E_F . Toutes les grandeurs thermodynamiques sont donc des fonctions universelles de E_F et T/T_F . Par exemple, nous avons :

$$\mu = \xi E_F = (1 + \beta) E_F, \quad T_c = \alpha T_F. \quad (1.58)$$

La valeur de ξ a été calculée à l'aide de différentes méthodes. Le résultat de la théorie BCS (cf. équations (1.48) et (1.49)) est $\xi = 0.59$. L'approximation de la matrice T que nous présenterons dans le chapitre 5 donne $\xi = 0.455$ [PPS04]. Enfin, plusieurs calculs de type Monte-Carlo ont permis d'aboutir à la valeur $\xi = 0.42(1)$ [ABCG04, CR05] ou $\xi = 0.449(9)$ [Jui07]. La température critique a également été calculée à l'aide de calculs Monte-Carlo. Pour un système uniforme, après un premier désaccord entre $\alpha = 0.23(2)$ [BDM06] et $\alpha = 0.157(7)$ [BPST06], le consensus est désormais $\alpha = 0.152(7)$ [BKP⁺08]. Enfin, en intégrant la relation (1.58), nous trouvons que l'énergie par particule est donnée par $E/N = 3\xi E_F/5$.

1.3.5 Expériences

Après avoir atteint le régime de dégénérescence quantique pour un gaz de ^{40}K [DJ99] puis de ^6Li [TSM⁺01], les expériences se sont orientées vers l'exploration de la transition BEC-BCS. Ainsi, les premiers bosons composites ont été formés en 2003 avec des

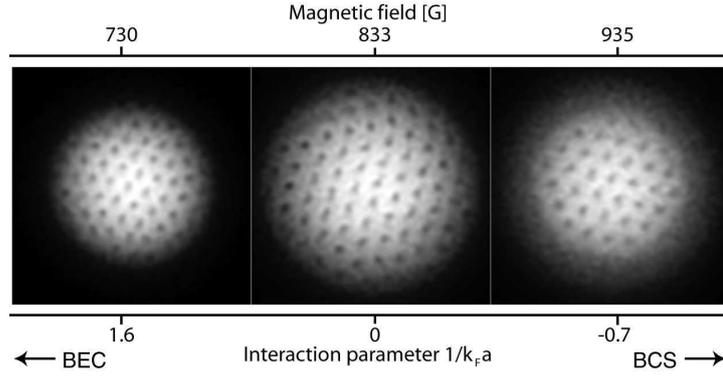


FIG. 1.7: La présence de vortex comme mise en évidence de la superfluidité tout au long de la transition BEC-BCS dans un gaz de ${}^6\text{Li}$ non polarisé [ZAS⁺05].

atomes de ${}^{40}\text{K}$ dans le groupe de Jin au JILA [RTBJ03]. De nombreux autres succès ont suivi notamment à Rice, au MIT, à l'ENS et à Innsbruck avec des atomes de ${}^6\text{Li}$. La même année, le premier condensat de Bose-Einstein de bosons composites a été obtenu simultanément par plusieurs groupes. Nous représentons sur la figure 1.6 les résultats de l'expérience réalisée au JILA avec des atomes de ${}^{40}\text{K}$ [GRJ03].

Pour montrer que le système est superfluide tout au long de la transition BEC-BCS, le groupe de Ketterle au MIT a réalisé une expérience qui consiste à mettre en rotation un gaz de ${}^6\text{Li}$ à $T \simeq 0.07 T_F$ [ZAS⁺05]. Comme le montre la figure 1.7, ils ont alors observé l'apparition de vortex quantifiés qui sont le témoin direct de la superfluidité. Ces vortex sont présents aussi bien du côté BEC que du côté BCS de la résonance et aucun comportement singulier ne semble se manifester à l'unitarité lorsque la longueur de diffusion diverge.

Une autre série de mesures a consisté à vérifier la valeur du paramètre universel ξ à l'unitarité. Il est par exemple possible de l'obtenir à partir du rayon du nuage atomique dans le piège. En effet, la relation $\mu = \xi E_F$ montre que l'équation d'état (1.39) est simplement multipliée par ξ . À l'aide de l'approximation de densité locale, nous pouvons en déduire que le rayon de Thomas-Fermi est alors $R = \xi^{1/4} R^0$, où R^0 est le rayon du gaz sans interaction. Partridge *et al.* à Rice ont ainsi obtenu $\xi = 0.46(5)$ [PLK⁺06]. D'autres mesures ont permis d'obtenir $\xi = 0.41(15)$ (${}^6\text{Li}$ – ENS), $\xi = 0.51(4)$ (${}^6\text{Li}$ – Duke), $\xi = 0.27_{-0.12}^{+0.09}$ (${}^6\text{Li}$ – Innsbruck), $\xi = 0.46_{-0.05}^{+0.12}$ (${}^{40}\text{K}$ – JILA).

1.4 Gaz de fermions polarisés

Jusqu'à maintenant, nous avons supposé que le système était composé du même nombre d'atomes dans les deux états hyperfins. Nous avons donc naturellement les mêmes densités $n_\downarrow = n_\uparrow$ et les mêmes énergies de Fermi $E_{F\downarrow} = E_{F\uparrow}$. Nous pouvons également considérer les situations plus complexes où il y a un déséquilibre de populations $N_\downarrow \neq N_\uparrow$ ou des masses différentes $m_\downarrow \neq m_\uparrow$ pour les deux états fermioniques utilisés, provoquant un déséquilibre entre les potentiels chimiques $\mu_\downarrow \neq \mu_\uparrow$. La réalisation récente de ces nouvelles configurations dans les gaz de fermions ultrafroids a stimulé de nom-

breuses études à la fois théoriques et expérimentales [CM10]. Sans perte de généralité, nous pouvons supposer que $N_\downarrow < N_\uparrow$, c'est-à-dire que l'espèce majoritaire est composée des atomes de spin \uparrow .

1.4.1 Limite de Clogston et Chandrasekhar

La fonction d'onde de la théorie BCS (1.52) suppose explicitement qu'il y a le même nombre d'atomes dans chaque espèce de spin $N_\downarrow = N_\uparrow = N/2$. Plus précisément, dans le régime de couplage faible, la superfluidité BCS provient de l'appariement de deux fermions de spins différents et d'impulsions opposées proches de la surface de Fermi. Un déséquilibre de populations est donc naturellement défavorable à la formation de paires de Cooper. Si l'écart entre les surfaces de Fermi est trop important, la superfluidité est perdue et une transition de phase vers un état normal est attendue. La première étude de cette transition a été réalisée par Clogston et Chandrasekhar [Clo62, Cha62] qui ont prédit une transition du premier ordre à l'aide d'une théorie de champ moyen. En introduisant le potentiel chimique moyen μ et la différence des potentiels chimiques h qui joue le rôle d'un champ magnétique effectif :

$$\mu = \frac{\mu_\uparrow + \mu_\downarrow}{2}, \quad h = \frac{\mu_\uparrow - \mu_\downarrow}{2}, \quad (1.59)$$

nous devons minimiser l'énergie dans l'ensemble grand canonique qui s'écrit $f(\Delta; h, \mu) = \langle H_{\text{BCS}} - \mu_\uparrow N_\uparrow - \mu_\downarrow N_\downarrow \rangle = \langle H_{\text{BCS}} - \mu N - h \Delta N \rangle$ où nous avons noté $N = N_\uparrow + N_\downarrow$, $\Delta N = N_\uparrow - N_\downarrow$ et Δ le gap. Nous pouvons alors écrire des équations tout à fait analogues à (1.48) et (1.49) [PY06]. La transition se produit lorsque l'énergie de l'état normal $f(\Delta = 0; h_c, \mu)$ est égale à l'énergie de l'état superfluide $f(\Delta_{\text{BCS}}; h_c, \mu)$ où le gap Δ_{BCS} est donné par l'équation (1.53). Dans la limite BCS $a \rightarrow 0^-$, il vient [SR07] :

$$h_c = \frac{\Delta_{\text{BCS}}}{\sqrt{2}}. \quad (1.60)$$

Pour un faible déséquilibre $\Delta N \ll N$, cette relation peut s'écrire à l'aide de la polarisation :

$$P = \frac{\Delta N}{N} = \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{N_\uparrow + N_\downarrow} \in [0, 1]. \quad (1.61)$$

En effet, puisque $E_{F\sigma} \propto N_\sigma^{2/3}$, pour $P \ll 1$, la différence des potentiels chimiques est donnée par $h = 2E_F P/3$. En prenant en compte la correction de Gorkov et Melik-Barkhudarov dans l'expression du gap, la valeur critique de la polarisation pour laquelle se produit la transition de phase est :

$$P_c = \frac{3}{\sqrt{8}} \left(\frac{2}{e}\right)^{7/3} e^{-\pi/2k_F|a|}. \quad (1.62)$$

Pour $P > P_c$, le système est normal et correspond à un mélange des deux espèces de spin très bien décrit par le modèle du gaz de Fermi idéal sans interaction. Pour $P < P_c$, la phase BCS superfluide et non polarisée coexiste avec une phase normale, pour laquelle la différence des potentiels chimiques est donnée par la relation (1.60), indépendamment

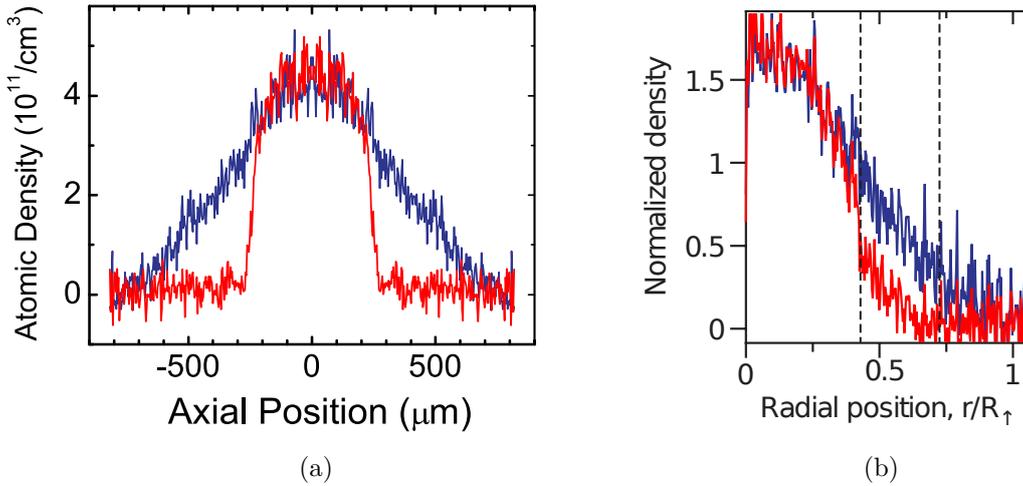


FIG. 1.8: Densité des atomes \uparrow en bleu et \downarrow en rouge d'un gaz de ${}^6\text{Li}$ polarisé, piégé dans un potentiel harmonique à l'unitarité $1/k_F a = 0$, dans l'expérience de Rice (a) [PLK⁺06] et du MIT (b) [ZSSK06a]. (a) : suivant l'axe longitudinal, $P = 35\%$, $N = 2 \cdot 10^5$ atomes, $\lambda = \omega_z/\omega_\perp \simeq 0.022$. (b) : suivant l'axe radial, $P = 44\%$, $N = 8 \cdot 10^6$ atomes, $\lambda = \omega_z/\omega_\perp \simeq 0.162$.

de la polarisation P . Une étude plus approfondie montre cependant que la transition entre la phase normale et la phase superfluide peut être beaucoup plus complexe, avec l'apparition de phases superfluides exotiques. Ainsi, quelques années après l'étude de Clogston et Chandrasekhar, Fulde et Ferrell [FF64] et Larkin et Ovchinnikov [LO64] ont considéré la formation de paires de Cooper dont l'impulsion totale n'est pas nulle. Il est alors à nouveau possible de former des paires à partir de fermions proches de leur surface de Fermi respective. Au voisinage de la transition normale-superfluide, cette situation est énergétiquement favorable par rapport à la phase normale. Ils ont donc obtenu une augmentation du domaine de stabilité de la phase superfluide [Com01, Com08]. Cette phase appelée FFLO semble cependant difficile à observer dans les gaz de fermions ultrafroids. En effet, puisque le gap est très petit dans le régime BCS, nous avons déjà vu que les expériences sont pour l'instant limitées à des valeurs de $k_F|a|$ relativement grandes, pour lesquelles l'existence de cette phase n'est pas garantie. Remarquons enfin que si la valeur critique de h_c donnée par (1.60) avait été supérieure au gap $h_c > \Delta$, il aurait été plus favorable énergétiquement pour le système de casser des paires et créer des quasi-particules d'énergie E_k . Nous aurions alors eu une phase superfluide sans gap et la transition vers l'état normal aurait été continue. Une telle phase superfluide polarisée est attendue dans la limite BEC où le condensat de bosons composites coexiste avec les atomes de l'espèce majoritaire non appariés dès que $P \neq 1$.

1.4.2 Expériences

Pour les supraconducteurs, la limite de Clogston et Chandrasekhar correspond en pratique à des champs magnétiques supérieurs aux champs critiques. Il faut de plus s'affranchir du couplage orbital. Bien que prédite au cours des années 1960, celle-ci est donc

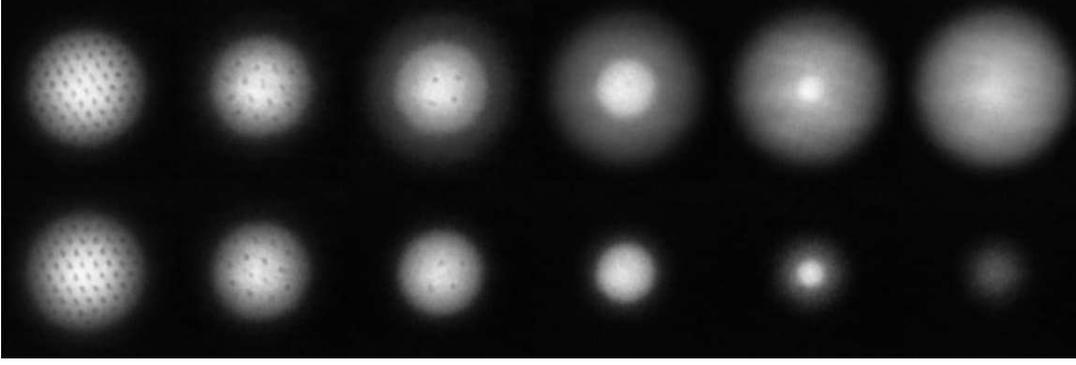


FIG. 1.9: La présence de vortex comme mise en évidence de la superfluidité dans un gaz de ${}^6\text{Li}$ polarisé [ZSSK06a]. Les images ont été réalisées lorsque $B = 853\text{ G}$ correspondant à $1/k_F a = -0.15$ pour une polarisation croissante de gauche à droite $P = 0\%, 7\%, 16\%, 48\%, 58\%, 74\%$. Pour $P > 70(5)\%$, le cœur superfluide n'est plus présent.

restée longtemps invérifiée. Après l'observation de la superfluidité dans des gaz d'atomes ultrafroids équilibrés, les groupes de Hulet à l'Université Rice [PLK⁺06, PLL⁺06] et de Ketterle au MIT [ZSSK06b, ZSSK06a, SZS⁺06] ont obtenu simultanément des gaz de fermions ultrafroids polarisés. Bien que présentant des différences, ces deux expériences ont confirmé la prédiction de Clogston et Chandrasekhar avec l'existence d'une polarisation critique en dessous de laquelle la phase superfluide est stable. En effet, ils ont observé que le nuage atomique s'organise en couches avec au centre un cœur superfluide où les densités des deux espèces sont égales, et autour une phase polarisée. De plus, en faisant tourner le nuage, le groupe du MIT a observé que des vortex apparaissaient uniquement dans le cœur, ce qui confirme que la phase centrale est superfluide, alors que la phase externe est normale. Indiquons comment il est possible de comprendre cette organisation du nuage en couches. D'après l'approximation de densité locale (cf. section 1.2.4), si les potentiels de piégeage sont les mêmes pour les deux espèces (ce qui est le cas pour ces expériences), la différence des potentiels chimiques h est constante dans le nuage, alors que la densité décroît lorsqu'on s'éloigne du centre. Puisque le gap Δ est une fonction croissante de la densité, il est maximal au centre. L'étude de Clogston et Chandrasekhar montre alors qu'une phase superfluide non polarisée occupe le centre du piège, tant que $\Delta \gtrsim h$, ce qui est en accord avec les observations expérimentales.

Malgré une ressemblance qualitative entre les deux expériences de Rice et du MIT, il existe une différence majeure entre les phases normales (cf. figure 1.8). En effet, alors que le groupe de Rice a observé une phase normale où seuls les atomes de l'espèce majoritaire sont présents, les expériences du MIT ont montré la présence de deux régions distinctes dans la phase normale :

- une phase totalement polarisée analogue à celle de Rice située sur le bord du piège ;
- une phase mixte entre la phase totalement polarisée et la phase superfluide, où les deux espèces de spin sont présentes.

Par conséquent, dans l'expérience de Rice, sauf lorsque $P = 1$, le cœur superfluide est toujours présent. Ceci est en contradiction avec les résultats du groupe du MIT qui a

mis en évidence l'existence d'une polarisation critique P_c au-dessus de laquelle le centre du nuage n'est plus superfluide (cf. figure 1.9). En particulier, à l'unitarité $1/k_F a = 0$, ils ont trouvé $P_c \simeq 0.77$. Indiquons que les résultats du MIT ont été confirmés par une expérience récente réalisée à l'ENS dans le groupe de C. Salomon et F. Chevy [NNJ⁺09]. Plusieurs études ont été réalisées pour essayer d'expliquer les résultats de Rice. Ainsi, il a été suggéré qu'à cause de la forte anisotropie ω_z/ω_\perp du potentiel de piégeage, la tension de surface semble jouer un rôle majeur et l'approximation de densité locale est violée.

1.4.3 Séparation de phases à l'unitarité

À la suite de ces deux expériences, de nombreuses études théoriques ont été réalisées pour obtenir le diagramme de phases à température nulle. Chevy [Che06] a utilisé un argument simple qui a permis de confirmer l'existence d'une phase intermédiaire normale. À l'unitarité, le grand potentiel thermodynamique $\langle H - \mu_\uparrow N_\uparrow - \mu_\downarrow N_\downarrow \rangle$ qui est proportionnel à la pression, peut être calculé facilement à la fois dans la phase totalement polarisée qui correspond à un gaz idéal de fermions sans interaction, et dans la phase superfluide non polarisée dont le comportement universel est décrit par le seul coefficient ξ . En comparant les deux valeurs, on en déduit que la phase superfluide est énergétiquement favorable seulement si $\mu_\downarrow/\mu_\uparrow > (2\xi)^{3/5} - 1 \simeq -0.10(1)$. On obtient ainsi une borne inférieure du rapport $\mu_\downarrow/\mu_\uparrow$ pour l'existence de la phase superfluide. De même, la limite d'existence de la phase normale polarisée correspond à la limite de $\mu_\downarrow/\mu_\uparrow$ lorsque $x = N_\downarrow/N_\uparrow \rightarrow 0$, c'est-à-dire lorsque le système est composé d'un unique atome de spin \downarrow en présence d'une mer de Fermi de N atomes de spin \uparrow . À l'aide d'un ansatz variationnel que nous présenterons dans le chapitre 2, il a obtenu la majoration $\mu_\downarrow/\mu_\uparrow < -0.6$. Ainsi, on en déduit qu'à l'unitarité, lorsque $-0.6 < \mu_\downarrow/\mu_\uparrow < -0.10(1)$, il existe une ou plusieurs phases intermédiaires normales, comme cela a été observé dans l'expérience du MIT.

Une description plus quantitative a ensuite été réalisée par le groupe de Giorgini et Stringari [LRGS06] grâce à des calculs de type Fixed-Node Monte-Carlo. Elle a permis d'obtenir le diagramme de phases d'un gaz de fermions homogène (sans potentiel de piégeage) à l'unitarité en fonction de $x = N_\downarrow/N_\uparrow$. Lorsque $N_\downarrow = 0$, l'énergie du système est celle d'un gaz de fermions idéal composé d'atomes \uparrow sans interaction. Elle est donnée par la formule usuelle :

$$E_{\text{NFP}} = \frac{3}{5} N_\uparrow E_{F\uparrow}, \quad (1.63)$$

où $E_{F\uparrow} = (6\pi^2 n_\uparrow)^{2/3}/2m$ est l'énergie de Fermi. Lorsqu'on rajoute un unique atome \downarrow avec une petite impulsion \mathbf{p} , nous pouvons écrire la variation d'énergie sous la forme :

$$E[\mathbf{p}] \simeq \mu_\downarrow + \frac{p^2}{2m^*}. \quad (1.64)$$

Cette énergie s'identifie avec la relation de dispersion d'une quasi-particule \downarrow habillée par les atomes \uparrow dont le potentiel chimique est μ_\downarrow et la masse effective est m^* . Cette quasi-particule est fermionique. Ainsi, lorsqu'on rajoute plus d'atomes \downarrow pour créer une petite densité $n_\downarrow \neq 0$, ces quasi-particules forment une petite mer de Fermi en occupant

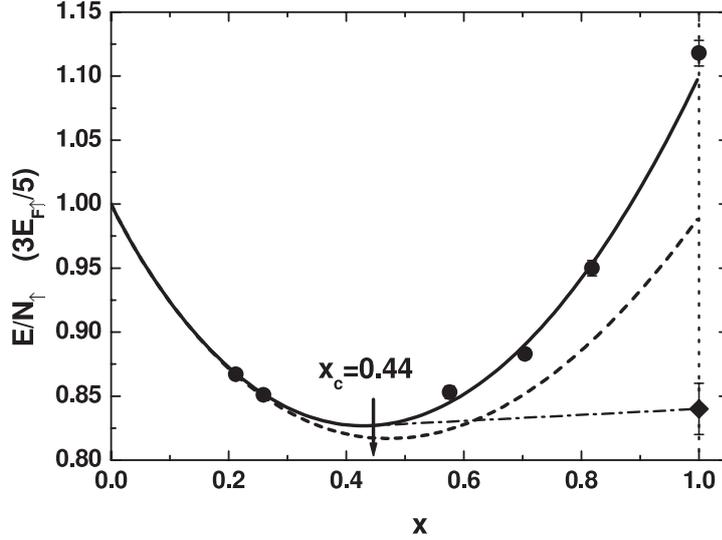


FIG. 1.10: Énergie de la phase normale d'un gaz de fermions à l'unitarité en fonction de $x = n_{\downarrow}/n_{\uparrow}$ [LRGS06]. Les points ronds avec barres d'erreur correspondent aux calculs Monte-Carlo. La courbe en trait plein est obtenue par régression polynomiale. La courbe en tirets correspond au développement (1.66) où les coefficients μ_{\downarrow} et m^* ont été calculés pour $N_{\downarrow} = 1$. Lorsque $x = 1$, l'énergie du superfluide donnée par le paramètre ξ est également indiquée. La ligne en tirets-points correspond à la ligne de coexistence de la phase normale et de la phase superfluide non polarisée.

tous les états dont l'impulsion est inférieure à $k_{F\downarrow} = (6\pi^2 n_{\downarrow})^{1/3}$. Son énergie est donc :

$$\sum_{p < k_{F\downarrow}} E[\mathbf{p}] = \mu_{\downarrow} N_{\downarrow} + \frac{3}{5} N_{\downarrow} \frac{k_{F\downarrow}^2}{2m^*}, \quad (1.65)$$

où le deuxième terme du membre de droite de cette équation est analogue à celui de (1.63). En rajoutant l'énergie de la mer de Fermi d'atomes \uparrow sans interaction, nous trouvons que pour $x = n_{\downarrow}/n_{\uparrow} \ll 1$, l'énergie de la phase normale partiellement polarisée est :

$$E_{N_{PP}} \simeq \frac{3}{5} N_{\uparrow} E_{F\uparrow} \left(1 - \frac{5}{3} \frac{|\mu_{\downarrow}|}{E_{F\uparrow}} x + \frac{m}{m^*} x^{5/3} \right), \quad (1.66)$$

où nous avons utilisé $\mu_{\downarrow} = -|\mu_{\downarrow}| < 0$, puisque l'interaction est attractive. Cette expression est un développement en puissances de x , valable uniquement pour de petites valeurs de x , pour lesquelles l'interaction entre quasi-particules \downarrow peut être négligée. μ_{\downarrow} et m^* ont été obtenus à l'aide de calcul Monte-Carlo de type Fixed-Node lorsque $N_{\uparrow} = 33$ et $N_{\downarrow} = 1$. Ils ont obtenu $\mu_{\downarrow} = -0.582(12) E_{F\uparrow}$ et $m^* = 1.04(3) m$, puis [PG08] $\mu_{\downarrow} = -0.594(6) E_{F\uparrow}$ et $m^* = 1.09(2) m$. L'énergie de la phase normale a également été calculée lorsque $N_{\downarrow} = 7, 19, 27, 33$ et $N_{\uparrow} = 27, 33$. Les résultats sont représentés sur la figure 1.10. La courbe en trait plein est obtenue par régression polynomiale. Ainsi, on observe que le développement de l'énergie (1.66) reste relativement bon jusqu'à des valeurs assez grandes de la concentration $x \sim 0.4$. En utilisant cette régression polynomiale,

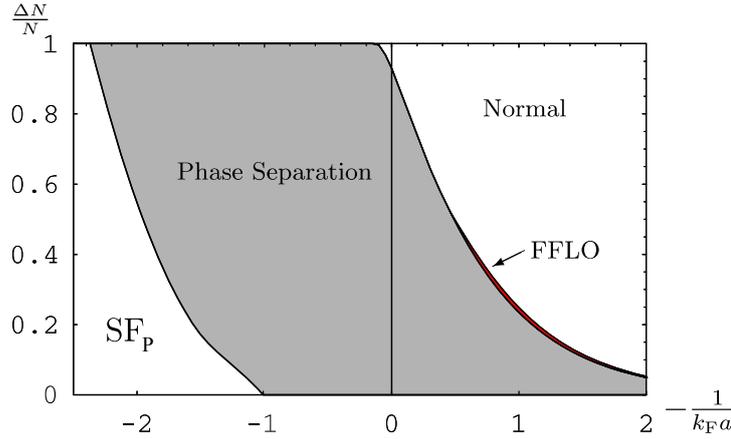


FIG. 1.11: Diagramme de phases à température nulle en fonction de l'interaction et de la polarisation $P = \Delta N/N$ obtenu par une théorie de champ moyen [SR07].

il est également possible de déterminer la première correction Fx^2 sous la parenthèse du développement (1.66). Ce terme décrit l'interaction entre quasi-particules. Pilati et Giorgini ont obtenu $F = 0.14$ [PG08]. Lorsque $N_\downarrow = N_\uparrow$, nous voyons que l'énergie de la phase normale est naturellement inférieure à l'énergie des deux mers de Fermi sans interaction $(6/5)N_\uparrow E_{F\uparrow}$ puisque l'interaction est attractive. Nous savons de plus que nous avons alors une phase superfluide dont l'énergie est donnée par le paramètre universel ξ :

$$E_{\text{SF}_0} = 2\xi \frac{3}{5} N_\uparrow E_{F\uparrow}. \quad (1.67)$$

En utilisant la construction de Maxwell pour obtenir l'énergie minimale, ils en ont déduit l'existence d'une transition du premier ordre entre la phase normale polarisée et la phase superfluide non polarisée, située à $x_c = 0.44$, ce qui correspond à une polarisation critique $P_c = 0.39$. De plus, à la transition, les potentiels chimiques des deux espèces $\mu_\sigma = \partial E / \partial N_\sigma$ vérifient, d'après leurs calculs Monte-Carlo, $\mu_\downarrow / \mu_\uparrow = 0.017$, en accord avec la borne inférieure obtenue par Chevy [Che06]. Ainsi, si $P > P_c$ seule la phase normale est présente, alors que si $P < P_c$ il y a coexistence d'une phase superfluide non polarisée et d'une phase normale dont la concentration est $x_c = 0.44$.

Une théorie de champ moyen a également été utilisée pour obtenir la valeur critique de la concentration à la transition [DSM06, PY06]. Elle ne permet cependant pas une description quantitative du diagramme de phases à l'unitarité puisqu'elle prédit $x_c = 0.04$. Indiquons enfin qu'une étude similaire a été effectuée par Bausmerth *et al.* [BRS09] à partir de calculs Monte-Carlo lorsque les deux états fermioniques considérés n'ont pas la même masse $m_\downarrow \neq m_\uparrow$.

1.4.4 Diagramme de phases

L'étude précédente peut naturellement être étendue en dehors de l'unitarité pour obtenir le diagramme de phases en fonction de l'interaction et de la polarisation. Les premiers résultats ont été obtenus à l'aide d'une théorie de champ moyen [PWY06b, PWY06a, SR07, PMLS07b, PMLS07a, RS09]. Le diagramme correspondant est représenté sur la

figure 1.11. Notons que sur cette figure et la figure 1.12, sur l'axe des abscisses est porté $-1/k_F a$, le régime BCS $a \rightarrow 0^-$ est donc sur la droite et le régime BEC $a \rightarrow 0^+$ est sur la gauche, contrairement à toutes les autres figures que nous présenterons dans cette thèse. Comme nous l'avons vu, la validité de cette théorie de champ moyen ne peut être justifiée au voisinage de l'unitarité où les effets à N-corps jouent un rôle important. Cependant, le diagramme obtenu est qualitativement correct. En particulier, dans la limite BCS, la polarisation critique devient de plus en plus faible et il existe une phase de type FFLO entre la phase mixte et la phase normale. Dans la limite BEC, le superfluide est robuste puisque l'énergie nécessaire pour casser les paires devient très grande $\epsilon_b = 1/2m_r a^2 \rightarrow \infty$ et il est plus favorable énergétiquement de former le maximum de dimères (c'est-à-dire N_\downarrow), les $N_\uparrow - N_\downarrow$ autres fermions \uparrow interagissant avec ces bosons composites. Nous noterons SF_P cette phase superfluide polarisée.

Le groupe de Giorgini a obtenu une description plus quantitative de ce diagramme de phases à l'aide de calculs Monte-Carlo [PG08]. Ils ont pour cela comparé l'énergie des trois phases déjà étudiées à l'unitarité (N_{FP} , N_{PP} , SF_0) et la phase superfluide polarisée SF_P . L'énergie de la phase normale totalement polarisée N_{FP} ($N_\downarrow = 0$) est donnée par l'équation (1.63). Celle de la phase normale partiellement polarisée N_{PP} est obtenue par des calculs Monte-Carlo pour différentes valeurs de $x = N_\downarrow/N_\uparrow$. Pour $x \ll 1$, elle peut être approchée par le développement (1.66) (avec éventuellement un terme supplémentaire Fx^2 pour tenir compte de l'interaction entre quasi-particules) où les coefficients μ_\downarrow , m^* et F dépendent de l'interaction $1/k_F a$. Pour la phase superfluide non polarisée SF_0 , la relation (1.67) n'est plus valable, l'énergie a été calculée à l'aide d'une méthode Monte-Carlo [ABCG04]. Enfin, l'énergie de la phase superfluide polarisée SF_P est obtenue par des calculs Monte-Carlo pour différentes valeurs de $y = N_\downarrow/N_\uparrow$. Pour $1/k_{F\uparrow} a \gtrsim 0.5$, celle-ci est très bien décrite par :

$$E_{SF_P} = E_{SF_0}(N_\downarrow) + \frac{3}{5}N_\uparrow E_{F\uparrow} \left[(1-y)^{5/3} + \frac{5k_{F\uparrow} a_3}{3\pi} y(1-y) \right], \quad (1.68)$$

où le premier terme est l'énergie du superfluide non polarisé formé des N_\downarrow paires, le deuxième correspond à l'énergie de la mer de Fermi des $N_\uparrow - N_\downarrow$ atomes \uparrow restants et le troisième décrit au niveau champ moyen l'interaction entre les bosons composites et les atomes \uparrow , il fait intervenir la longueur de diffusion atome-dimère que nous obtiendrons à la fin du chapitre 4. Pilati et Giorgini [PG08] ont ainsi obtenu le diagramme de phases de la figure 1.12. On retrouve sur ce diagramme les transitions du premier ordre entre la phase normale et la phase superfluide obtenues à l'aide d'une théorie de champ moyen (cf. figure 1.11). Cette étude a permis de préciser les lignes de transition et le domaine d'existence des différentes séparations de phases. En particulier, dans la limite $P \rightarrow 1$, ils ont trouvé que la phase normale partiellement polarisée n'existe plus dès que $1/k_{F\uparrow} a > 0.73$. Cette valeur est en très bon accord avec les expériences réalisées au MIT dans les groupes de Ketterle et Zwierlein. En effet, Shin *et al.* [SSSK08b] ont montré, en extrapolant la valeur critique de la polarisation P_c , qu'au-delà de la valeur $1/k_F a = 0.74(4)$, la phase superfluide est toujours présente. Schirotzek *et al.* [SWSZ09] ont ensuite mesuré le résidu de quasi-particule pour différentes valeurs de l'interaction à l'aide d'une expérience de spectroscopie RF utilisant une transition vers un autre état

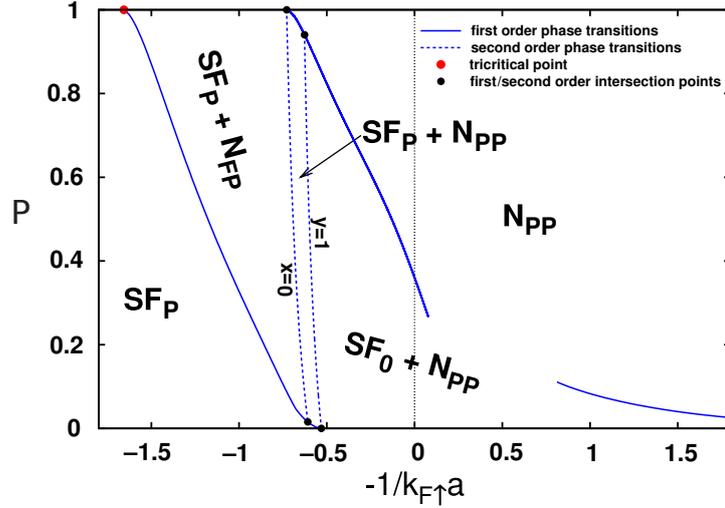


FIG. 1.12: Diagramme de phases à température nulle en fonction de l'interaction et de la polarisation $P = (N_{\downarrow} - N_{\uparrow}) / (N_{\downarrow} + N_{\uparrow})$ obtenu par Pilati et Giorgini [PG08]. Sur la ligne $P = 1$, les deux points d'intersection sont situés en $1/k_{F\uparrow}a = 1.7$ et $1/k_{F\uparrow}a = 0.73$. Sur la ligne $P = 0$, le point d'intersection est situé en $1/k_{F\uparrow}a = 0.53$.

hyperfine. Pour une concentration d'atomes \downarrow , $x = N_{\downarrow}/N_{\uparrow}$ de 5%, ils ont observé que le résidu s'annule lorsque $1/k_{F\uparrow}a = 0.76(2)$. Enfin, indiquons que la précision des calculs de Pilati et Giorgini ne leur permet pas de garantir la stabilité de la phase mixte $SF_P + N_{PP}$.

1.4.5 Séparation de phases dans un potentiel harmonique

Toutes les études qui ont été présentées jusqu'à maintenant ont été réalisées dans un système homogène, c'est-à-dire sans potentiel extérieur. Pour décrire les expériences à l'unitarité, Lobo *et al.* [LRGS06] ont utilisé l'approximation de densité locale. Elle permet de relier le potentiel chimique local au potentiel harmonique de piégeage V_{trap} à l'aide de la relation :

$$\mu_{\sigma}(\mathbf{r}) = \mu_{\sigma}^0 - V_{\text{trap}}(\mathbf{r}), \quad \text{pour } r \leq R_{\sigma}, \quad (1.69)$$

où la constante μ_{σ}^0 est imposée par la contrainte de normalisation $\int n_{\sigma}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N_{\sigma}$. Nous supposons pour simplifier que V_{trap} est isotrope $V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) = (1/2)m\omega^2 r^2$.

Pour une petite concentration d'atomes \downarrow $N_{\downarrow} \ll N_{\uparrow}$, seule la phase normale est présente et on peut négliger la modification de μ_{\uparrow} . La densité n_{\uparrow} est alors simplement donnée par le profil de Thomas-Fermi d'un gaz idéal (cf. équation (1.42)) et son rayon est $R_{\uparrow} = R_{\uparrow}^0$. Pour les atomes \downarrow , l'Hamiltonien effectif qui se déduit de la relation de dispersion (1.64) s'écrit :

$$H_{\text{eff}} = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{\mu_{\downarrow}}{\mu_{\uparrow}} \mu_{\uparrow}(\mathbf{r}) + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m^*} + \left(1 + \frac{|\mu_{\downarrow}|}{\mu_{\uparrow}}\right) V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + \text{cst.}, \quad (1.70)$$

où le rapport $|\mu_{\downarrow}|/\mu_{\uparrow} \simeq 0.6$ est supposé indépendant de \mathbf{r} et égal à sa valeur limite pour

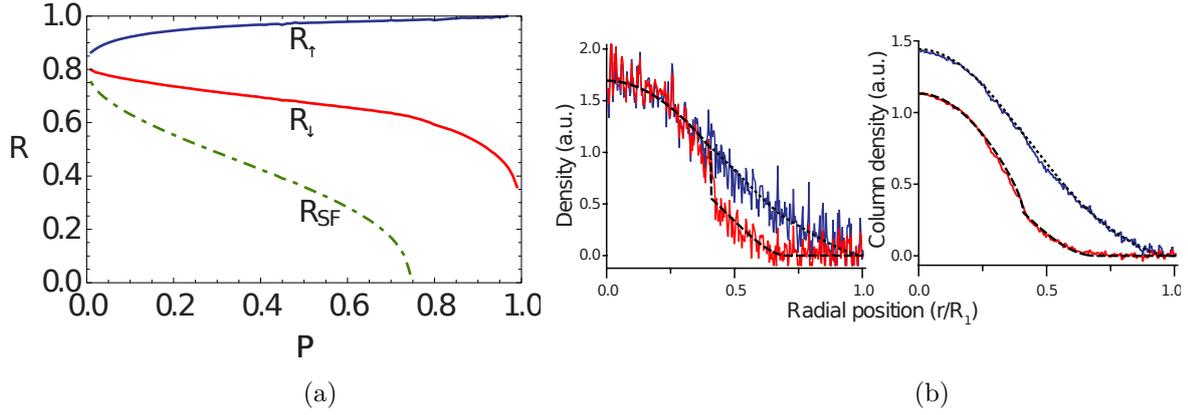


FIG. 1.13: (a) Rayons des différentes phases dans le piège harmonique à l'unitarité en unité du rayon $R_{\uparrow}^0 = a_{\text{oh}}(48N_{\uparrow})^{1/6}$ d'un gaz d'atomes \uparrow sans interaction, en fonction de la polarisation [LRGS06]. (b) Densité et densité intégrée, des atomes \uparrow en bleu et des atomes \downarrow en rouge, en unité arbitraire, en fonction de la position radiale, à l'unitarité pour une polarisation $P = 0.43$, obtenues à l'aide de calculs Monte-Carlo [RLS08] et comparaison avec les expériences du MIT [SSSK08c, SSSK08b].

$N_{\downarrow} \rightarrow 0$. La fréquence des oscillations dans le piège est donc :

$$\omega^* = \omega \sqrt{\left(1 + \frac{|\mu_{\downarrow}|}{\mu_{\uparrow}}\right) \frac{m}{m^*}}. \quad (1.71)$$

Cette relation a permis la première mesure dynamique de la masse effective m^* par le groupe de C. Salomon et F. Chevy à l'ENS [NNJ⁺09].

Lorsqu'au centre du piège la concentration des atomes \downarrow est supérieure à la valeur critique $x_c = 0.44$, un cœur superfluide se forme. Nous avons alors $0.017 < \mu_{\downarrow}^0/\mu_{\uparrow}^0 < 1$ où 0.017 correspond à la valeur critique pour l'existence de la phase superfluide obtenue dans le cas homogène. Lorsqu'on s'éloigne du centre, d'après la relation (1.69) le rapport $\mu_{\downarrow}(\mathbf{r})/\mu_{\uparrow}(\mathbf{r})$ diminue, jusqu'à atteindre la valeur critique 0.017 pour $r = R_{SF}$. Au-delà, le système est normal et le rapport $\mu_{\downarrow}(\mathbf{r})/\mu_{\uparrow}(\mathbf{r})$ décroît à nouveau. Il atteint la valeur critique $\simeq -0.6$ lorsqu'il n'y a plus d'atomes \downarrow , c'est-à-dire lorsque $r = R_{\downarrow}$. Le système est alors un gaz idéal d'atomes \uparrow sans interaction et la densité $n_{\uparrow}(\mathbf{r})$ est donnée par le profil de Thomas-Fermi. Le rayon de l'espèce majoritaire vérifie donc l'équation $\mu_{\uparrow}^0 - V_{\text{trap}}(r = R_{\uparrow}) = 0$. Lobo *et al.* ont ainsi pu obtenir le rayon des différentes phases à l'aide des équations d'état déduites de leurs calculs Monte-Carlo pour un système homogène. Leurs résultats sont représentés sur la figure 1.13-(a). Ils ont également trouvé la valeur critique de la polarisation $P_c = 0.77$ au-delà de laquelle le cœur superfluide n'est plus présent. Notons que cette valeur est en excellent accord avec les expériences du MIT [ZSSK06a] que nous avons présentées au début de cette section. Inversement, par analyse des profils de densité, Shin [Shi08] a pu en déduire la valeur critique de la concentration dans le cas homogène. Son résultat $x_c = 0.53(5)$ est en bon accord avec la valeur 0.44 obtenue par Lobo *et al.*. Enfin, remarquons sur la figure 1.13-(a) que lorsque $P \rightarrow 0$, les trois rayons

tendent vers $\xi^{1/4} R_{\uparrow}^0 \simeq 0.81 R_{\uparrow}^0$ qui est le rayon du gaz non polarisé.

À l'aide de l'équation d'état, il est également possible de calculer la densité des deux espèces $n_{\uparrow}(\mathbf{r})$ et $n_{\downarrow}(\mathbf{r})$ dans le piège [RLS08]. Les résultats qui sont représentés sur la figure 1.13-(b) sont à nouveau en très bon accord avec les dernières expériences du groupe de Ketterle au MIT [SSSK08c, SSSK08b]. Enfin, en généralisant cette étude en dehors de l'unitarité, Bertaina et Giorgini [BG09] ont obtenu un diagramme de phases analogue à celui de la figure 1.12 pour un gaz d'atomes piégés.

1.4.6 Le problème à N+1 corps

Comme nous venons de le voir, deux grandeurs jouent un rôle important dans la détermination du diagramme de phases et la description des expériences avec des gaz de fermions ultrafroids polarisés, il s'agit du potentiel chimique μ_{\downarrow} et de la masse effective m^* d'un unique atome \downarrow en présence d'une mer de Fermi d'atomes \uparrow . C'est le problème à N+1 corps qui a constitué le cœur de cette thèse. Nous terminerons ce chapitre par une revue des résultats à la fois théoriques et expérimentaux concernant l'étude de ce problème qui ont été obtenus avant et pendant cette thèse.

- **Études théoriques.** — Ce problème a été considéré pour la première fois par Chevy [Che06]. À l'aide d'un ansatz variationnel, il a obtenu la majoration $\mu_{\downarrow} < -0.6066 E_F$ à l'unitarité. Une étude similaire a été effectuée par Bulgac et Forbes [BF07]. Les premiers calculs Monte-Carlo (de type Fixed-Node) ont été réalisés par Lobo *et al.* [LRGS06], ils ont obtenu $\mu_{\downarrow} = -0.582(12) E_F$ et $m^* = 1.04(3) m$. L'étude variationnelle a ensuite été généralisée en dehors de l'unitarité, pour des masses différentes et une impulsion totale non nulle par Combescot *et al.* [CRLC07]. Ils ont notamment obtenu la masse effective $m^* = 1.17 m$ à l'unitarité. D'autres calculs Monte-Carlo utilisant un modèle sur réseau [JC02, Jui07] ont permis d'obtenir $\mu_{\downarrow} = -0.64(1) E_F$ et $m^* = 1.4(1) m$. Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a] ont ensuite réalisé des calculs de type Diagrammatique Monte-Carlo. En particulier, ils ont obtenu $\mu_{\downarrow} = -0.615(3)$ à l'unitarité et ont mis en évidence, pour une longueur de diffusion $a > 0$, une transition avec un changement de la nature de la quasi-particule. Avant la transition (côté BCS), la quasi-particule est appelée polaron. Il s'agit d'un atome \downarrow habillé par des atomes \uparrow comme le représente la figure 1.14-(a). Après la transition, l'atome \downarrow forme un état lié avec un atome \uparrow et les autres atomes \uparrow habillent ce dimère. La situation est représentée sur la figure 1.14-(b). Nous avons ensuite, à l'aide d'un développement général de la fonction d'onde, expliqué l'efficacité du premier ansatz variationnel et obtenu une solution essentiellement exacte pour le polaron [CG08]. En particulier, à l'unitarité nous trouvons $\mu_{\downarrow} = -0.6156 E_F$ et $m^* = 1.20 m$. De nouveaux calculs Fixed-Node Monte-Carlo ont alors permis d'obtenir le terme décrivant l'interaction entre quasi-particules $F = 0.14$ à l'unitarité [PG08], puis en dehors de l'unitarité [BG09]. Nous avons également considéré la situation à une dimension [GC09]. Enfin, nous avons généralisé notre étude pour décrire l'état lié à l'aide d'une approche diagrammatique [CGL09]. Simultanément, Mora et Chevy [MC09] et Punk *et al.* [PDZ09] ont obtenu une description variationnelle de cet état lié. Tout récemment, Mora et Chevy [MC10] ont obtenu $F = 0.21$ à l'unitarité et Bruun et Massignan [BM10] ont étudié la nature de la transition polaron - état lié.

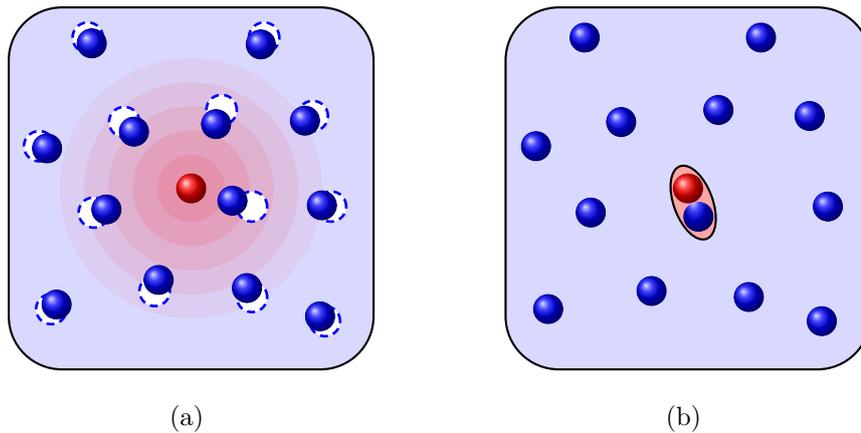


FIG. 1.14: Représentation schématique du polaron (a), un atome \downarrow habillé par les atomes \uparrow , et de l'état lié (b), un dimère $\downarrow\uparrow$ habillé par les autres atomes \uparrow . Figure reproduite de [SWSZ09].

Remarquons que les écarts entre les différents résultats que nous venons de présenter se révèlent a posteriori être très faibles, si bien qu'en pratique la précision obtenue va au-delà de ce qu'on peut espérer actuellement mesurer expérimentalement. Ces nombreux travaux théoriques ont cependant permis d'apporter une meilleure compréhension de la physique de ce problème à $N+1$ corps.

- **Mesures expérimentales.** — Ces travaux théoriques ont stimulé et ont été stimulés par plusieurs études expérimentales qui ont suivi les deux premières expériences réalisées avec des gaz de fermions polarisés au MIT [ZSSK06a] et à Rice [PLK⁺06].

La première observation du polaron a été réalisée par le groupe de Ketterle au MIT à l'aide d'une expérience de spectroscopie RF [SSSK08a]. La quasi-particule se manifeste alors par la présence d'un pic dans le spectre mesuré. En réduisant la polarisation à $P = 5\%$, ils ont ensuite pu déterminer plus précisément la position du pic de quasi-particule et en déduire la valeur du potentiel chimique du polaron à l'unitarité : $\mu_{\downarrow} = -0.64(7) E_F$ ou $\mu_{\downarrow} = -0.72(9) E_F$ en fonction de l'état hyperfin utilisé pour l'espèce minoritaire [SWSZ09, Che09]. Précédemment, en analysant les profils de densité d'autres expériences du MIT [SSSK08c, SSSK08b], Shin [Shi08] avait obtenu le potentiel chimique $\mu_{\downarrow} = -0.58(5) E_F$ et la masse effective $m^* = 1.06 m$.

La première mesure dynamique de la masse effective du polaron a été réalisée à l'ENS dans le groupe de C. Salomon et F. Chevy [NNJ⁺09]. En étudiant les modes de compression d'un gaz de fermions polarisé, ils ont obtenu $m^* = 1.17(10) m$. À l'aide d'une méthode astucieuse leur permettant un accès direct à l'équation d'état, ils ont ensuite pu augmenter la précision de leur mesure aussi bien à l'unitarité $m^* = 1.20(2) m$ [NNJ⁺10] qu'en dehors de l'unitarité [NNCS10].

Le polaron : approche hamiltonienne

Dans ce chapitre, nous utilisons une approche hamiltonienne pour résoudre le problème à $N + 1$ corps, qui joue notamment un rôle majeur dans la détermination du diagramme de phases d'un gaz de fermions polarisé. Nous présentons dans un premier temps un calcul variationnel où la fonction d'onde considérée ne possède qu'une seule excitation particule-trou. Nous considérons ensuite la situation où l'impureté a une masse infinie. Nous montrons que le problème est alors exactement soluble et comparons notre solution exacte aux résultats donnés par le calcul variationnel. De manière surprenante, l'accord avec cette solution exacte ou avec les calculs Monte-Carlo lorsque les masses sont égales, se révèle être assez bon, non seulement dans la limite de couplage faible, mais aussi lorsque le système est en interaction forte au voisinage de l'unitarité. Pour éclaircir ce mystère, nous avons mis en place un développement de la fonction d'onde faisant intervenir un nombre arbitraire de paires particule-trou [CG08]. Ce traitement à N -corps complet constitue le cœur de ce chapitre et montre que cet accord résulte d'un phénomène d'interférences destructives. La série d'approximations successives que nous obtenons converge très rapidement et fournit donc une solution essentiellement exacte du problème, lorsque l'interaction n'est pas assez forte pour produire un état lié.

2.1 Ansatz variationnel : une paire particule-trou

2.1.1 L'Hamiltonien du système

Considérons un système homogène (sans potentiel extérieur) à température nulle composé de N fermions de spin \uparrow et de masse m_\uparrow , interagissant avec un unique fermion de spin \downarrow de masse m_\downarrow . On note $n_\uparrow = k_F^3/(6\pi^2)$ la densité des atomes \uparrow . L'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (2.1)$$

où H_0 est le terme d'énergie cinétique :

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \frac{p_{i\uparrow}^2}{2m_\uparrow} + \frac{p_\downarrow^2}{2m_\downarrow}. \quad (2.2)$$

À très basse température, nous avons vu dans le chapitre précédent que l'Hamiltonien d'interaction H_{int} ne couple que les fermions de spin opposé. Il s'écrit :

$$H_{\text{int}} = \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_{i\uparrow} - \mathbf{r}_{i\downarrow}). \quad (2.3)$$

En introduisant les opérateurs $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ et $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ qui créent et détruisent un fermion de spin σ en \mathbf{r} et qui satisfont à la relation d'anticommutation $\{\psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}')\} = \delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, l'Hamiltonien se réécrit en seconde quantification dans l'espace réel sous la forme :

$$H = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m_{\sigma}} \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Enfin, en utilisant la décomposition des opérateurs sur les ondes planes, qui sont les modes propres de l'impulsion :

$$\psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{et} \quad \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{P}} b_{\mathbf{P}} e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.5)$$

où \mathcal{V} est le volume de quantification que nous ferons tendre vers l'infini à densité $n_{\uparrow} = N_{\uparrow}/\mathcal{V}$ fixée pour obtenir la limite thermodynamique, $c_{\mathbf{k}}$ et $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ sont les opérateurs de destruction et de création d'un atome de spin \uparrow $\{c_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$, alors que $b_{\mathbf{P}}$ et $b_{\mathbf{P}}^{\dagger}$ sont ceux de l'atome de spin \downarrow $\{b_{\mathbf{P}}, b_{\mathbf{P}'}^{\dagger}\} = \delta_{\mathbf{P},\mathbf{P}'}$, nous obtenons l'expression usuelle :

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{P}} E_{\mathbf{P}} b_{\mathbf{P}}^{\dagger} b_{\mathbf{P}} + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} b_{\mathbf{P}}^{\dagger} b_{\mathbf{P}'}, \quad (2.6)$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2m_{\uparrow}$, $E_{\mathbf{P}} = \mathbf{P}^2/2m_{\downarrow}$, $V_{\mathbf{q}}$ est la transformée de Fourier de V (cf. équation (1.14)) et le symbole de Kronecker $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'}$ assure la conservation de l'impulsion en imposant $\mathbf{k} + \mathbf{P} = \mathbf{k}' + \mathbf{P}'$.

De plus, nous utiliserons le potentiel introduit dans le chapitre 1 (cf. équation (1.24)). Nous introduisons donc une coupure k_c que nous ferons tendre vers l'infini et la transformée de Fourier $V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$ est alors simplement la constante de couplage g qui ne dépend pas de \mathbf{k} et \mathbf{k}' et tend vers 0 lorsque $k_c \rightarrow \infty$. Enfin, pour simplifier les expressions, nous prendrons désormais $\mathcal{V} = 1$, ce volume pouvant être rétabli sans aucune difficulté par homogénéité. Nous retiendrons simplement que les sommes sur les vecteurs d'onde sont en fait des intégrales puisque nous nous plaçons dans la limite thermodynamique. Ainsi, l'Hamiltonien d'interaction s'écrit :

$$H_{\text{int}} = g \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} b_{\mathbf{P}}^{\dagger} b_{\mathbf{P}'}, \quad (2.7)$$

où la somme est limitée à des vecteurs d'onde inférieurs à k_c et la constante de couplage g est liée à la longueur de diffusion a du potentiel à l'aide de la relation (1.28). Physiquement, ce potentiel d'interaction peut créer ou détruire des paires particule-trou dans la mer de Fermi d'atomes \uparrow ou simplement diffuser des particules ou des trous, l'impulsion additionnelle étant fournie par l'atome \downarrow .

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, nous souhaitons calculer en particulier le potentiel chimique et la masse effective de l'atome \downarrow . Remarquons que par invariance par translation du système, l'impulsion totale du système est conservée. Ainsi, l'état de plus basse énergie ayant une impulsion totale \mathbf{p} décrit une quasi-particule dont nous souhaitons calculer l'énergie $E[\mathbf{p}]$.

2.1.2 Fonction d'onde et énergie de la quasi-particule

La première étude de ce problème a été réalisée par Chevy [Che06]. Dans la limite de couplage faible $a \rightarrow 0^-$, la mer de Fermi d'atomes \uparrow est très peu modifiée et nous pouvons développer la fonction d'onde à l'aide de la théorie des perturbations. À l'ordre 1, l'état fondamental du système sans interaction, correspondant à un atome \downarrow d'impulsion nulle et à une mer de Fermi d'atomes \uparrow que nous noterons $|0\rangle = \prod_{k < k_F} c_k^\dagger |vac\rangle$, se couple aux premiers états excités qui sont obtenus par création d'une paire particule-trou à partir de la mer de Fermi. La fonction d'onde prend donc la forme :

$$|\psi\rangle = \alpha_0 b_0^\dagger |0\rangle + \sum'_{\mathbf{kq}} \alpha_{\mathbf{kq}} b_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}} |0\rangle, \quad (2.8)$$

où le deuxième terme correspond à la création d'une particule d'impulsion \mathbf{k} et d'un trou d'impulsion \mathbf{q} . Nous avons donc $k > k_F$ et $q < k_F$, cette restriction sera indiquée à partir de maintenant par la notation \sum' . Naturellement pour assurer la conservation de l'impulsion totale, l'atome \downarrow acquiert alors l'impulsion $\mathbf{q} - \mathbf{k}$.

De même, pour un état d'impulsion totale \mathbf{p} , nous cherchons la fonction d'onde sous la forme :

$$|\psi\rangle = \alpha_0 b_{\mathbf{p}}^\dagger |0\rangle + \sum'_{\mathbf{kq}} \alpha_{\mathbf{kq}} b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}} |0\rangle, \quad (2.9)$$

et souhaitons calculer les coefficients α_0 et $\alpha_{\mathbf{kq}}$ pour obtenir l'énergie minimale. Pour cela, nous écrivons l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ et projetons sur les sous-espaces à 0 et 1 paire particule-trou. Cette procédure est donc équivalente à un calcul variationnel par restriction de la fonction d'onde [CTDL73]. La projection sur $b_{\mathbf{p}}^\dagger |0\rangle$ nous donne :

$$E_{\mathbf{p}} \alpha_0 + g \sum'_{\mathbf{KQ}} \alpha_{\mathbf{KQ}} = E \alpha_0. \quad (2.10)$$

Dans cette équation, le premier terme correspond à l'énergie cinétique et le deuxième provient de la recombinaison d'une paire particule-trou par action du potentiel d'interaction H_{int} . Précisons que nous avons pris pour zéro d'énergie, l'énergie de la mer de Fermi d'atomes \uparrow $E_{\text{FS}} = \sum_{q < k_F} \epsilon_q = 3/5 N E_F$, plus l'énergie de champ moyen gn_\uparrow . Nous avons donc omis les deux termes correspondants. De même, la projection sur $b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}} |0\rangle$ donne :

$$(E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}}) \alpha_{\mathbf{kq}} + g \alpha_0 + g \sum'_{\mathbf{K}} \alpha_{\mathbf{Kq}} - g \sum'_{\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{kQ}} = E \alpha_{\mathbf{kq}}. \quad (2.11)$$

À nouveau le premier terme provient de l'énergie cinétique, le deuxième terme correspond à la création d'une paire particule-trou à partir de l'état à 0 paire, le troisième et le

quatrième décrivent respectivement la diffusion de la particule ou du trou. Remarquons maintenant que l'énergie E est négative. En effet, le potentiel d'interaction H_{int} est attractif et nous avons pris pour origine des énergies, l'énergie du système sans interaction. Nous avons donc $E = -|E|$ et en notant $E_{\mathbf{p}}^{(0)} = |E| + E_{\mathbf{p}}$ et $E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)} = |E| + E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}}$, ces deux équations s'écrivent simplement :

$$-g^{-1}E_{\mathbf{p}}^{(0)}\alpha_0 = \sum'_{\mathbf{KQ}} \alpha_{\mathbf{KQ}}, \quad (2.12)$$

et

$$-g^{-1}E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}\alpha_{\mathbf{kq}} = \alpha_0 + \sum'_{\mathbf{K}} \alpha_{\mathbf{Kq}} - \sum'_{\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{kQ}}. \quad (2.13)$$

Comme nous le vérifierons par la suite, pour $k \rightarrow \infty$ nous avons $\alpha_{\mathbf{kq}} \sim 1/k^2$. Ainsi, lorsque nous faisons tendre la coupure k_c vers l'infini, les sommes sur \mathbf{K} sont divergentes et ne donnent une contribution finie qu'après les avoir multipliées par la constante de couplage g qui tend vers 0. En comparaison, le troisième terme de l'équation (2.13) où la somme est limitée à $Q < k_F$ est convergente et donne une contribution nulle après multiplication par g . Nous pouvons donc l'omettre. En notant :

$$F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = g \sum'_{\mathbf{K}} \alpha_{\mathbf{Kq}}, \quad (2.14)$$

l'équation (2.13) s'écrit :

$$\alpha_{\mathbf{kq}} = -\frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}} [g\alpha_0 + F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})]. \quad (2.15)$$

Nous pouvons alors sommer cette équation sur \mathbf{k} . En regroupant les termes faisant intervenir $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ dans le membre de gauche, nous obtenons :

$$F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) \left[g^{-1} + \sum'_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}} \right] = -g \sum'_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}} \alpha_0. \quad (2.16)$$

Rappelons maintenant que, pour calculer ces sommes, nous devons introduire une coupure k_c et utiliser l'expression de g en fonction de a et k_c (cf. équation (1.28)). Ainsi, pour $k_c \rightarrow \infty$, nous avons $g \rightarrow 0$. Plus précisément, à l'ordre dominant $g^{-1} \sim -\sum^{k_c} 2m_r/k^2$. Or, l'expression de $E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}$ montre que pour $k \rightarrow \infty$, $1/E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)} \sim 2m_r/k^2$. Nous en déduisons donc que dans la limite $k_c \rightarrow \infty$, le membre de droite de l'équation (2.16) vaut simplement α_0 . De même, en scindant la somme sur \mathbf{k} intervenant dans l'expression de g (cf. équation (1.28)) en $k < k_F$ et $k_F < k < k_c$, et en calculant explicitement la partie correspondant à $k < k_F$, nous pouvons exprimer le crochet du membre de gauche de l'équation (2.16) à l'aide de la longueur de diffusion a pour obtenir :

$$F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) \left[\frac{m_r}{2\pi a} - \frac{m_r k_F}{\pi^2} + \sum'_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}} - \frac{2m_r}{k^2} \right) \right] = \alpha_0. \quad (2.17)$$

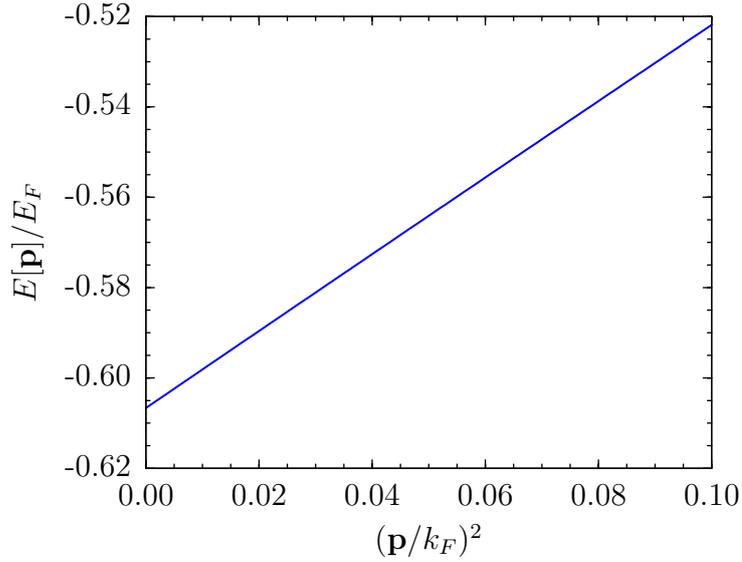


FIG. 2.1: Énergie du polaron en fonction de l'impulsion \mathbf{p} lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow$ et $1/k_F a = 0$.

Remarquons que la somme sur \mathbf{k} est désormais convergente, nous pouvons donc omettre la coupure k_c . De plus, cette somme peut être calculée analytiquement en fonction de E , \mathbf{p} et \mathbf{q} , mais pour alléger la présentation, nous ne donnerons pas son expression ici. Indiquons simplement qu'elle peut être déduite immédiatement de l'expression analytique de T_2 donnée dans l'équation (5.20). Dès lors, en injectant cette expression de $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ dans l'équation (2.12), nous obtenons :

$$-|E| = E_{\mathbf{p}} + \sum'_{\mathbf{q}} \left[\frac{m_r}{2\pi a} - \frac{m_r k_F}{\pi^2} + \sum'_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}} - \frac{2m_r}{k^2} \right) \right]^{-1}. \quad (2.18)$$

Remarquons que naturellement le coefficient α_0 s'est simplifié, cela résulte de l'homogénéité des équations (2.12) et (2.13). Nous supposons donc jusqu'à la fin de cette section que $\alpha_0 = 1$, de sorte que le terme qui intervient sous la somme est simplement $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$. Cette équation est une équation implicite pour l'énergie $E[\mathbf{p}]$ de la quasi-particule décrite par la fonction d'onde (2.9) puisque E intervient également dans l'expression de $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$. Cette quasi-particule est appelée polaron par analogie avec le concept usuel de polaron qui a été introduit par Landau [Lan33], puis repris par Pekar [Pek54]. En effet, dans un solide cristallin, la présence d'un électron a pour effet de polariser le réseau et on peut considérer que l'électron habillé par les phonons forme une quasi-particule. Ici, l'atome \downarrow attire et polarise les atomes \uparrow , la quasi-particule étant alors composée de l'impureté habillée par des paires particule-trou.

2.1.3 Résultats

La résolution numérique de l'équation (2.18) ne pose aucune difficulté. Pour $m_\downarrow = m_\uparrow$ et $1/k_F a = 0$, la variation de $E[\mathbf{p}]$ en fonction de \mathbf{p} est représentée sur la figure 2.1. Ainsi, comme attendu physiquement, la plus petite valeur de E est obtenue pour $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Plus

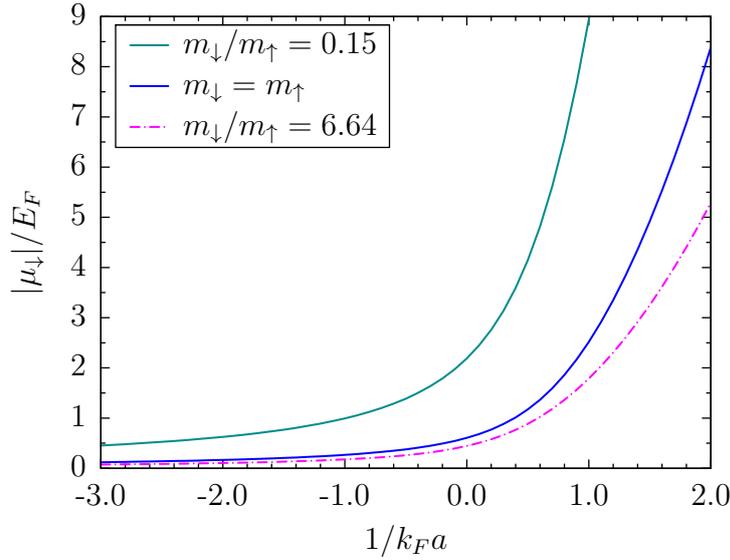


FIG. 2.2: Potentiel chimique du polaron décrit par l'ansatz variationnel (2.9) en fonction de $1/k_F a$ pour différents rapports des masses $r = m_\downarrow/m_\uparrow$. De haut en bas : $r = 0.15$ (${}^6\text{Li}$ - ${}^{40}\text{K}$), $r = 1$, $r = 6.64$ (${}^{40}\text{K}$ - ${}^6\text{Li}$).

précisément, puisque l'énergie est mesurée à partir de l'énergie du système sans interaction, $E[\mathbf{0}]$ correspond à l'énergie minimale nécessaire pour ajouter un unique atome \downarrow à la mer de Fermi d'atomes \uparrow , c'est donc le potentiel chimique μ_\downarrow . La masse effective est alors donnée par le comportement à petite impulsion de l'énergie de la quasi-particule : $E[\mathbf{p}] \approx \mu_\downarrow + p^2/2m^*$. Elle est donc obtenue à l'aide de la pente de la courbe de la figure 2.1. Pour ces paramètres, nous obtenons $\mu_\downarrow = -0.6066 E_F$ et $m^* = 1.17 m_\downarrow$. Remarquons sur la figure 2.1 que le comportement quadratique en fonction de \mathbf{p} ne se limite pas qu'aux petites valeurs de p . En effet, le calcul de la pente de la droite reliant les deux points correspondant à $p = 0$ et $p = \sqrt{0.1} k_F = 0.31 k_F$ donne une masse effective de $1.179 m_\downarrow$ alors que l'extrapolation à petit p donne $1.172 m_\downarrow$. Nous utiliserons cette propriété en calculant la masse effective à partir de la valeur de $E[p]$ pour $p = 0.1 k_F$ (et $p = 0.03 k_F$ pour contrôle) et éviterons ainsi les erreurs liées à la précision numérique.

Nous représentons sur les figures 2.2 et 2.3 le potentiel chimique et la masse effective du polaron pour des masses égales $m_\downarrow = m_\uparrow$ et pour un rapport des masses correspondant aux mélanges ${}^{40}\text{K}$ - ${}^6\text{Li}$ ($r = m_\downarrow/m_\uparrow = 6.64$) et ${}^6\text{Li}$ - ${}^{40}\text{K}$ ($r = 1/6.64 \approx 0.15$) considérés dans les expériences en cours à Innsbruck [WSK⁺08] et à Munich [TVA⁺08, VTC⁺09]. Dans la limite de couplage faible, le potentiel chimique tend naturellement vers 0 et la masse effective vers m_\downarrow . Nous étudierons davantage cette limite à la fin de cette section. Lorsque l'interaction augmente, le potentiel chimique et la masse effective augmente, puisque de plus en plus d'atomes \uparrow habitent l'unique atome \downarrow . Remarquons cependant que la masse effective reste relativement faible jusqu'à l'unitarité $m^* \lesssim 1.5 m_\downarrow$ par rapport à ce qu'on peut observer dans d'autres systèmes comme l'Hélium 3 superfluide dans l'Hélium 4 où m^*/m_{He} prend des valeurs comprises entre 3 et 6 [AER⁺66, BBP67]. Ce résultat est très surprenant et inattendu puisque nous avons alors $a = \infty$ et les interactions sont très fortes. Enfin, nous observons qu'à partir d'un moment, la masse effective diverge puis

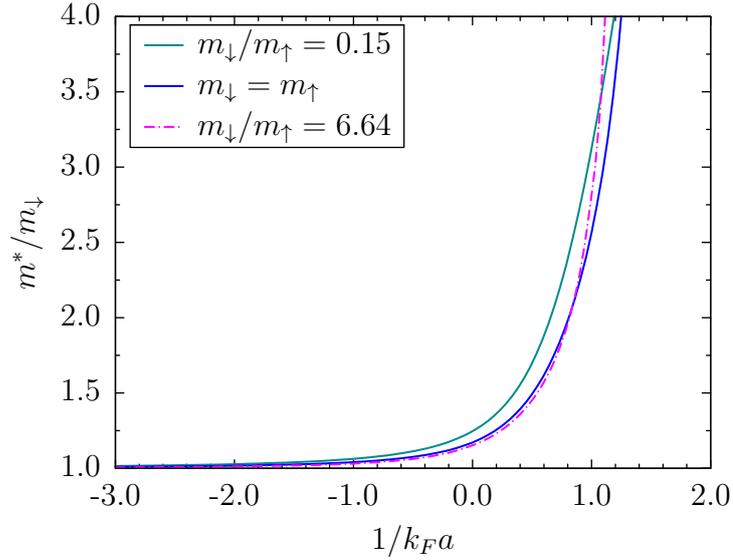


FIG. 2.3: Masse effective du polaron décrit par l'ansatz variationnel (2.9) en fonction de $1/k_F a$ pour différents rapports des masses $r = m_\downarrow/m_\uparrow$.

devient négative. Nous interpréterons cette propriété dans le chapitre 5.

Nous avons également représenté sur la figure 2.4, le potentiel chimique et la masse effective du polaron en fonction du rapport des masses $r = m_\downarrow/m_\uparrow$. Nous trouvons que lorsque r tend 0, le potentiel chimique tend vers $-\infty$. Cela peut être obtenu simplement à partir de l'équation (2.18) puisque nous avons alors $m_r \approx m_\downarrow$. Dans l'autre limite $m_\downarrow \rightarrow \infty$, nous voyons que le potentiel chimique tend vers une valeur finie. Nous reviendrons sur cette limite dans la prochaine section. Enfin, nous remarquons que m^*/m_\downarrow dépend très faiblement du rapport des masses r .

2.1.4 Approximation q petit et comparaison aux calculs Monte-Carlo

• **Approximation $q \rightarrow 0$.** — Nous présentons ici une propriété qui est un argument clé pour le traitement que nous allons mettre en place dans la dernière section de ce chapitre. Comme nous l'avons déjà indiqué, la résolution numérique de l'équation (2.18) est immédiate. Nous pouvons cependant choisir de négliger la dépendance en \mathbf{q} dans $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$, c'est-à-dire réaliser l'approximation $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)} \approx E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{0}}^{(1)}$. En effet, rappelons que le vecteur \mathbf{k} correspond au vecteur d'onde de la particule et $k > k_F$, alors que \mathbf{q} correspond à celui du trou et $q < k_F$. Ainsi, dans l'expression de $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$, les termes faisant intervenir \mathbf{q} sont négligeables par rapport à ceux faisant intervenir \mathbf{k} dans une grande partie du domaine d'intégration. L'expression de $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ devient alors très simple et l'équation pour le potentiel chimique est :

$$\frac{1}{3\xi^2} = -\frac{\pi}{2k_F a} + 1 + \xi \arctan \xi, \quad (2.19)$$

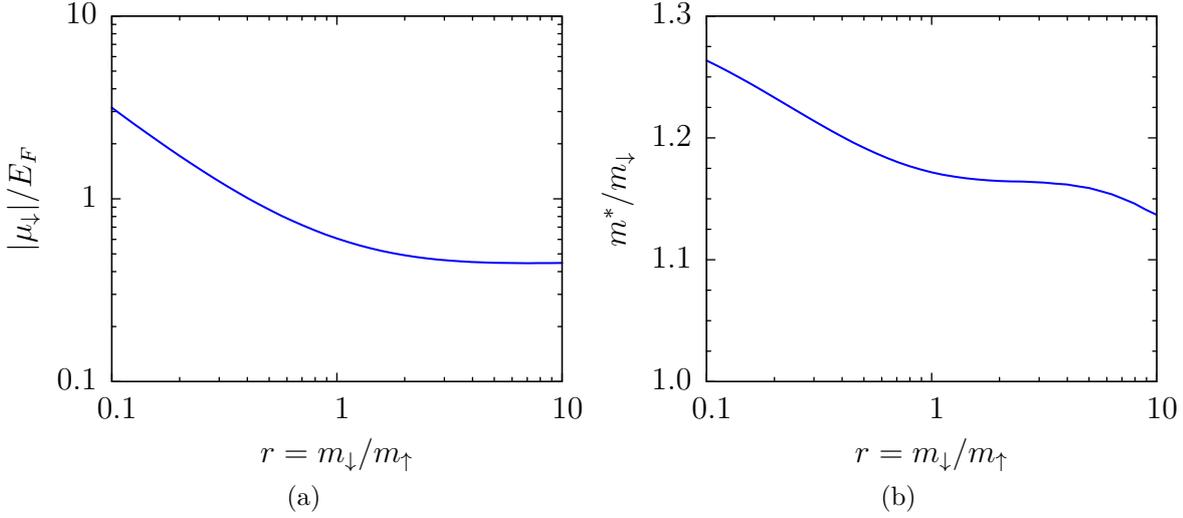


FIG. 2.4: Potentiel chimique (a) et masse effective (b) du polaron décrit par l'ansatz variationnel (2.9) en fonction du rapport des masses $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$ lorsque $1/k_F a = 0$ (unitarité).

où nous avons noté $\xi = \sqrt{2m_r |\mu_{\downarrow}|}/k_F = \sqrt{\rho m_r/m_{\uparrow}}$ et $\rho = |\mu_{\downarrow}|/E_F$. À l'unitarité, pour des masses égales, la résolution de cette équation donne $\mu_{\downarrow} = -0.5347 E_F$, alors que la résolution exacte de l'équation (2.18) nous avait donné $\mu_{\downarrow} = -0.6066 E_F$. Cette approximation assez brutale nous fournit donc déjà un résultat relativement satisfaisant. En fait, nous pouvons l'améliorer de manière significative si nous prenons en compte la première correction non nulle dans un développement en puissances de \mathbf{q} . Pour cela, nous développons $1/E_{0,\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$ à l'ordre 2 en \mathbf{q} , puisque le terme d'ordre 1 est nul après avoir effectué l'intégration angulaire sur \mathbf{k} . Ainsi, nous obtenons :

$$\langle [|E| + E_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}}]^{-1} \rangle_{\mathbf{k}} \approx \frac{1}{|E| + E_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{q^2 k^2}{3m_{\downarrow}^2 [|E| + E_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}]^3} - \frac{E_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{q}}}{[|E| + E_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}]^2}, \quad (2.20)$$

où $\langle \dots \rangle_{\mathbf{k}} = \int d\Omega_{\mathbf{k}}/(4\pi)$ désigne la moyenne sur l'angle solide associé au vecteur \mathbf{k} . En injectant cette expression dans l'équation (2.18), nous obtenons une équation dont la résolution numérique donne, pour des masses égales, à l'unitarité, la valeur $\mu_{\downarrow} = -0.5985 E_F$ qui est très proche de celle fournie par la résolution exacte. Ainsi, si nous superposons aux résultats de la figure 2.2 la valeur du potentiel chimique obtenue avec cette approximation, il est essentiellement impossible de distinguer les deux courbes. Cependant, nous avons observé que la situation est légèrement moins favorable lorsque les masses sont différentes. Cela résulte du dernier terme de l'équation (2.20) qui n'est alors pas nul, mais l'amélioration par rapport à la simple approximation $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ reste quand même significative.

• **Comparaison aux calculs Monte-Carlo.** — Indiquons maintenant les autres prédictions théoriques qui ont été obtenues à l'aide de calculs Monte-Carlo. Ceux-ci ont tous été réalisés dans la situation des masses égales. Pour un système fermionique, les simula-

tions Monte-Carlo sont souvent difficiles, puisqu'elles doivent faire face au problème du signe : la fonction d'onde de l'état fondamental s'annule et change de signe à cause de l'antisymétrie. Le premier calcul a été effectué par le groupe de Giorgini [LRGS06] à l'unitarité en utilisant une méthode de type Fixed-Node Diffusion Monte-Carlo. Ils ont obtenu $(5/3) \mu_{\downarrow}/E_F = -0.97(2)$ correspondant à $\mu_{\downarrow} = -0.582(12) E_F$ et $m^* = 1.04(3) m_{\downarrow}$. Comme son nom l'indique, la méthode consiste alors à imposer la surface nodale de la fonction d'onde pour se ramener à une densité de probabilité positive et éviter ainsi le problème du signe. Cependant, si ce choix n'est pas optimal, cette méthode ne fournit qu'une borne supérieure de l'énergie du fondamental, de la même manière qu'un calcul variationnel. Nous voyons ici que l'énergie donnée par l'ansatz variationnel (2.9) se trouve être inférieure au résultat du calcul Monte-Carlo. La comparaison de ces deux résultats soulève plusieurs interrogations qui ont constitué les premières motivations de cette thèse. Pourquoi à l'unitarité, c'est-à-dire lorsque l'interaction et les corrélations jouent un rôle majeur, un simple ansatz variationnel inspiré d'un calcul perturbatif a priori valable uniquement en couplage faible, donne un résultat relativement proche des calculs Monte-Carlo et se révèle même être meilleur ? La proximité des deux valeurs pour le potentiel chimique suggère qu'elles ne sont pas loin de la solution exacte, mais qu'en est-il exactement ? Enfin, pour le calcul de la masse effective, l'accord est moins bon et d'autres investigations sont nécessaires.

Pendant les tout premiers mois de cette thèse, Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a] ont publié les résultats qu'ils ont obtenus avec une autre méthode de type Monte-Carlo Diagrammatique. Il s'agit d'une technique nettement plus perfectionnée qui utilise le développement diagrammatique de la fonction de Green que nous présenterons dans le chapitre 4. La série complète des diagrammes est alors échantillonnée en utilisant des simulations Monte-Carlo et sa convergence est accélérée par des techniques de resommation. Indiquons que, contrairement aux calculs de type Fixed-Node, cette méthode se veut être exacte. À l'unitarité, ils ont obtenu $\mu_{\downarrow} = -0.615 E_F$ ou $\mu_{\downarrow} = -0.618 E_F$ en fonction de la technique de resommation utilisée. À nouveau, ces valeurs se révèlent être de façon surprenante assez proches de celle donnée par le simple ansatz variationnel (2.9). Enfin, de nouveaux calculs de type Fixed-Node [PG08] ont donné $(5/3) \mu_{\downarrow}/E_F = -0.99(1)$ (correspondant à $\mu_{\downarrow} = -0.594(6) E_F$) et $m^* = 1.09(2) m_{\downarrow}$.

2.1.5 Limite BCS et limite BEC

• **Limite BCS.** — Considérons maintenant la limite de couplage faible $a \rightarrow 0^-$ ou limite BCS, et calculons la valeur du potentiel chimique donnée par l'équation (2.18). Nous devons donc remplacer \mathbf{p} par $\mathbf{0}$ et puisque nous avons supposé $\alpha_0 = 1$, l'équation s'écrit alors $\mu_{\downarrow} = \sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{0}}(\mathbf{q})$. Dans cette limite, le terme dominant de $F_{\mathbf{0}}(\mathbf{q})$ est simplement le premier terme du crochet de l'équation (2.18), c'est-à-dire $F_{\mathbf{0}}(\mathbf{q}) = 2\pi a/m_r$. Nous en déduisons ensuite l'expression de μ_{\downarrow} à l'ordre 1 en $k_F a$:

$$\mu_{\downarrow} = \frac{ak_F^3}{3\pi m_r} = \frac{2\pi a}{m_r} n_{\uparrow}, \quad (2.21)$$

qui correspond à une description au niveau champ moyen de l'énergie d'interaction entre l'unique atome \downarrow et la mer de Fermi des atomes \uparrow , avec une constante de couplage $2\pi a/m_r$. Cela était attendu puisque le champ moyen coïncide avec la théorie des perturbations dans cette limite. Remarquons que nous avons naturellement $\mu_\downarrow \rightarrow 0$ lorsque $a \rightarrow 0^-$, comme nous l'avons déjà remarqué sur la figure 2.2. Nous pouvons également calculer le développement de μ_\downarrow à l'ordre 2 en $k_F a$. Celui-ci est donné par le terme d'ordre 0 du développement de $[F_0(\mathbf{q})]^{-1}$, nous pouvons donc simplement remplacer E par 0 dans l'expression de $E_{\mathbf{0},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$. Comme nous l'avons déjà indiqué, $F_0(\mathbf{q})$ peut être calculé analytiquement. Nous pouvons donc en déduire un développement de $F_0(\mathbf{q})$ à l'ordre 2 en $k_F a$. Alors que le terme à l'ordre 1 ne dépendait pas de \mathbf{q} , celui à l'ordre 2 est une fonction de \mathbf{q} assez complexe. Nous pouvons néanmoins calculer analytiquement la somme $\sum_{\mathbf{q}} F_0(\mathbf{q})$. Nous obtenons :

$$\mu_\downarrow = \frac{2\pi a}{m_r} n_\uparrow + \frac{m_\uparrow^2 - m_\downarrow^2 + 2m_\downarrow^2 \ln(m_\downarrow/m_\uparrow)}{2(m_\uparrow - m_\downarrow)^2} \frac{a^2 k_F^4}{\pi^2 m_\downarrow} + o(k_F a)^2. \quad (2.22)$$

Lorsque les masses sont égales $m_\downarrow = m_\uparrow = m$, $m_r = m/2$ et le facteur devant le terme d'ordre 2 vaut simplement 1, nous avons donc $\mu_\downarrow = 2ak_F^3/(3\pi m) + a^2 k_F^4/(\pi^2 m) + o(k_F a)^2$. Ce résultat pour des masses égales a été obtenu ultérieurement par Mora et Chevy [MC10] à l'aide d'un calcul à l'ordre 2 en théorie des perturbations. Enfin, dans la limite $m_\downarrow \rightarrow \infty$, nous remarquons que le terme d'ordre 2 est nul.

• **Limite BEC.** — Nous pouvons également étudier la limite BEC $a \rightarrow 0^+$ de l'équation (2.18). Physiquement, dans cette limite, nous nous attendons à la formation d'un état lié entre l'atome \downarrow et un atome \uparrow , et l'ansatz (2.9) ne décrit pas un tel état lié. Néanmoins, le calcul variationnel précédent reste valable, et nous pouvons étudier, au moins formellement, sa solution. Dans cette limite, le potentiel chimique tend vers $-\infty$, nous effectuons donc un développement asymptotique de l'expression qui est à l'intérieur du crochet de (2.18) correspondant à $[F_0(\mathbf{q})]^{-1}$:

$$\left[\frac{m_r F_0(\mathbf{q})}{2\pi} \right]^{-1} = \frac{1}{k_F a} - \sqrt{\gamma\rho} + \frac{1}{2} \hat{q}^2 \gamma^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\rho}} - \frac{2}{3\pi} \frac{1}{\gamma\rho} + O\left(\frac{1}{\rho^{3/2}}\right), \quad (2.23)$$

où nous avons noté $\rho = |\mu_\downarrow|/E_F$, $\hat{q} = q/k_F$ et $\gamma = m_r/m_\uparrow = m_\downarrow/M$. Nous pouvons alors obtenir un développement de ρ jusqu'à l'ordre 2 en $k_F a$ en procédant par étape. En ne retenant que les deux premiers termes et en utilisant $\mu_\downarrow = \sum_{\mathbf{q}} F_0(\mathbf{q})$ qui implique que $[F_0(\mathbf{q})]^{-1} \rightarrow 0$, nous déduisons d'abord $\sqrt{\gamma\rho} = 1/k_F a$, c'est-à-dire $\mu_\downarrow = -\epsilon_b \equiv -1/2m_r a^2$ qui est l'énergie de liaison du dimère $\downarrow\uparrow$. Nous écrivons ensuite $\rho = 1/(\gamma(k_F a)^2) + C + o(1)$, et calculons le développement à l'ordre 1 en $k_F a$ de $[F_0(\mathbf{q})]^{-1}$ à l'aide de (2.23). Nous obtenons :

$$F_0(\mathbf{q}) = \frac{4\pi/m_r}{(\gamma\hat{q}^2 - C)\gamma k_F a + o(k_F a)}. \quad (2.24)$$

Or, la relation $\mu_\downarrow = \sum_{\mathbf{q}} F_0(\mathbf{q})$ montre que $\sum_{\mathbf{q}} F_0(\mathbf{q}) \sim 1/(k_F a)^2$. Nous en déduisons donc que la fonction $1/(\gamma\hat{q}^2 - C)$ doit avoir une singularité au bord du domaine d'intégration (sinon nous aurions d'après (2.24) $\sum_{\mathbf{q}} F_0(\mathbf{q}) \sim 1/(k_F a)$), ainsi $C = \gamma = m_\downarrow/M =$

$1 - m_\uparrow/M$. Le terme d'ordre 0 de μ_\downarrow est donc $k_F^2/2M - E_F$. De la même manière, en utilisant le terme en $1/\rho$ du développement (2.23), nous pouvons calculer la correction à l'ordre 1 en $k_F a$. Ainsi, nous trouvons :

$$\mu_\downarrow = -\epsilon_b + \frac{k_F^2}{2M} - E_F + \frac{4\pi a}{m_\uparrow} n_\uparrow + o(k_F a), \quad (2.25)$$

que nous comparerons dans le chapitre 5 à la valeur du potentiel chimique de l'état lié. Remarquons que dans la limite $m_\downarrow \rightarrow \infty$, le terme d'ordre 0 est simplement $-E_F$.

2.2 Un système exactement soluble : une impureté de masse infinie

2.2.1 Expression du potentiel chimique

Nous nous intéressons dans cette section à une étude détaillée de la limite $m_\downarrow \rightarrow \infty$. Dans ce cas, le système considéré est exactement soluble puisqu'il se réduit au problème à un corps d'une impureté fixe interagissant avec une mer de Fermi sans interaction. En supposant que la limite thermodynamique et la limite de masse infinie commutent, nous pouvons le résoudre de la manière suivante. Nous plaçons l'impureté à l'origine d'une sphère de rayon R et cherchons les états propres du système en imposant l'annulation des fonctions d'onde sur son bord. Nous prendrons ensuite la limite thermodynamique en faisant tendre R vers l'infini. La symétrie sphérique du système nous permet d'isoler la partie angulaire des fonctions d'onde. Comme nous l'avons indiqué dans le chapitre 1, puisque le potentiel d'interaction est à courte portée et nous sommes à très basse température, les états propres ayant un moment cinétique orbital $l \neq 0$ ne sont pas diffusés par l'impureté, ce sont les mêmes que pour le problème libre. De plus, la fonction d'onde des états de diffusion en onde s s'écrit :

$$\varphi_k(\mathbf{r}) = A_k \frac{\sin(kr + \delta(k))}{r}, \quad (2.26)$$

où le déphasage $\delta(k)$ est relié à la longueur de diffusion à l'aide de la relation usuelle $\tan \delta(k) = -ka$ et la constante A_k est déterminée par la contrainte de normalisation $\int d\mathbf{r} |\varphi_k(\mathbf{r})|^2 = 1$. La valeur de k est quantifiée par la condition aux limites $\varphi_k(r = R) = 0$, nous avons donc $k_p R + \delta(k_p) = p\pi$ où p est un entier $p \geq 1$ et la constante A_k est alors donnée par :

$$A_k^2 = \frac{1}{2\pi R \left[1 + \frac{\sin 2\delta}{2kR}\right]} \simeq \frac{1}{2\pi R}. \quad (2.27)$$

Considérons tout d'abord la situation où la longueur de diffusion est négative $a < 0$. Dans ce cas, il n'y a pas d'état lié et les N atomes \uparrow forment une mer de Fermi en occupant les N états de diffusion de plus basse énergie. Parmi ces états de diffusion, il y en a M qui ont un moment cinétique orbital nul et dont la fonction d'onde est donnée par l'équation (2.26). Leur énergie est donc $k_p^2/2m_\uparrow$ avec $p = 1, \dots, M$ et le vecteur d'onde de Fermi est, à l'ordre $1/R$, le plus grand de ces vecteurs d'onde $k_F = k_M \simeq M\pi/R$. Le

potentiel chimique que nous souhaitons calculer correspond à la variation en énergie due à la présence de l'impureté. Or, sans impureté, les états avec $l \neq 0$ ont la même énergie, ils ne contribuent donc pas à cette variation d'énergie. Nous en déduisons :

$$\mu_{\downarrow} = \sum_{p=1}^M \left[\frac{k_p^2}{2m_{\uparrow}} - \frac{(p\pi/R)^2}{2m_{\uparrow}} \right]. \quad (2.28)$$

En divisant par l'énergie de Fermi $E_F = (M\pi/R)^2/2m_{\uparrow}$ et en remplaçant k_p par son expression $k_p = (p\pi - \delta(k_p))/R$, nous obtenons alors :

$$\frac{|\mu_{\downarrow}|}{E_F} = \sum_{p=1}^M \left[\left(\frac{p}{M} \right)^2 - \left(\frac{p}{M} - \frac{\delta(k_p)}{M\pi} \right)^2 \right] \simeq \frac{2}{\pi M^2} \sum_{p=1}^M p \delta(k_p), \quad (2.29)$$

où, dans la dernière égalité, nous avons négligé un terme en $1/M$ qui tend vers 0 dans la limite thermodynamique. Enfin, à l'ordre $1/M$, le déphasage s'écrit $\delta(k_p) = -\arctan((p/M)k_F a)$ et dans la limite $M \rightarrow +\infty$, la somme (2.29) devient une intégrale que nous pouvons calculer simplement :

$$\frac{|\mu_{\downarrow}|}{E_F} = -\frac{2}{\pi} \int_0^1 u \arctan(uk_F a) du = \frac{1}{\pi} \left[-(1+y^2) \arctan(1/y) + y \right], \quad (2.30)$$

où nous avons noté $y = 1/k_F a$.

Étudions maintenant la situation où la longueur de diffusion est positive $a > 0$. Dans ce cas, il existe un unique état lié. Dans la limite $R \rightarrow \infty$, son énergie est $-\epsilon_b = -1/2m_{\uparrow}a^2$ et sa fonction d'onde est (cf. équation (1.34)) :

$$\varphi_b(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{e^{-r/a}}{r}. \quad (2.31)$$

Cet état lié est occupé par un atome \uparrow , les autres atomes \uparrow occupant les $N - 1$ états de diffusion de plus basse énergie. Comme précédemment, parmi ces états de diffusion, il y en a M qui ont un moment cinétique orbital nul et dont la fonction d'onde est donnée par l'équation (2.26). Leur énergie est $k_p^2/2m_{\uparrow}$ avec $p = 1, \dots, M$ et le vecteur d'onde de Fermi est toujours, à l'ordre $1/R$, $k_F \simeq M\pi/R$. Cependant, par rapport à la situation sans impureté, nous avons maintenant l'état lié en plus et un état de diffusion d'énergie maximale E_F en moins. Nous en déduisons donc la valeur du potentiel chimique :

$$\mu_{\downarrow} = -\frac{1}{2m_{\uparrow}a^2} - E_F + \sum_{p=1}^M \left[\frac{k_p^2}{2m_{\uparrow}} - \frac{(p\pi/R)^2}{2m_{\uparrow}} \right]. \quad (2.32)$$

À nouveau, en divisant par l'énergie de Fermi $E_F = (M\pi/R)^2/2m_{\uparrow}$, nous obtenons :

$$\frac{|\mu_{\downarrow}|}{E_F} = \frac{1}{(k_F a)^2} + 1 + \sum_{p=1}^M \left[\left(\frac{p}{M} \right)^2 - \left(\frac{p}{M} - \frac{\delta(k_p)}{M\pi} \right)^2 \right] \simeq \frac{1}{(k_F a)^2} + 1 + \frac{2}{\pi M^2} \sum_{p=1}^M p \delta(k_p), \quad (2.33)$$

et, en utilisant l'expression du déphasage $\delta(k_p)$, dans la limite thermodynamique la somme se ramène à la même intégrale que l'équation (2.30). Nous trouvons donc :

$$\frac{|\mu_\downarrow|}{E_F} = y^2 + 1 + \frac{1}{\pi} \left[-(1 + y^2) \arctan(1/y) + y \right], \quad (2.34)$$

où nous avons noté comme précédemment $y = 1/k_F a$.

Enfin, en utilisant les propriétés de la fonction arctan pour $y < 0$ et $y > 0$, il est facile de voir que les deux équations (2.30) et (2.34) peuvent se mettre sous une forme commune valable quel que soit le signe de y :

$$\frac{|\mu_\downarrow|}{E_F} = \frac{1}{\pi} \left[(1 + y^2) \left(\frac{\pi}{2} + \arctan y \right) + y \right]. \quad (2.35)$$

Cette expression montre que dans la limite $m_\downarrow \rightarrow \infty$, le potentiel chimique est une fonction régulière (et même analytique) tout au long de la transition BEC-BCS : l'apparition de l'état lié qui se produit ici à l'unitarité ne provoque aucune singularité. Ce résultat n'a rien d'évident et nous y reviendrons au chapitre 5.

2.2.2 Densité locale de l'espèce majoritaire

Puisque nous avons déterminé les états propres du système dans la section précédente, nous pouvons en déduire la densité locale des atomes \uparrow : elle est simplement donnée par la somme des densités de probabilité de chaque état occupé. Sans impureté et dans la limite thermodynamique, cette densité est uniforme et vaut $n_\uparrow = k_F^3/(6\pi^2)$. Comme nous l'avons déjà indiqué, seuls les états de diffusion en onde s sont modifiés par la présence de l'impureté et il y a de plus formation d'un état lié lorsque $a > 0$. Nous pouvons donc écrire :

$$n_\uparrow(\mathbf{r}) = n_\uparrow + |\varphi_b(\mathbf{r})|^2 \theta(y) + \sum_{p=1}^M \left[|\varphi_{k_p}(\mathbf{r})|^2 - \frac{\sin^2(p\pi r/R)}{2\pi R r^2} \right], \quad (2.36)$$

où nous avons omis, lorsque $y > 0$, le terme correspondant à la fonction d'onde de l'unique état de diffusion qui n'est plus occupé, puisque sa contribution est nulle dans la limite thermodynamique. À nouveau, en remplaçant k_p et le déphasage $\delta(k_p)$ par leur expression à l'ordre dominant, $k_p = k_F p/M$ et $\delta(k_p) = -\arctan(p/M k_F a)$, dans la limite $M \rightarrow +\infty$, la somme devient une intégrale et nous obtenons :

$$\frac{n_\uparrow(\mathbf{r})}{n_\uparrow} = 1 + 3\pi y \frac{e^{-2\hat{r}y}}{\hat{r}^2} \theta(y) + \frac{3}{\hat{r}^2} \int_0^1 \left[\sin^2(u\hat{r} - \arctan(u/y)) - \sin^2(u\hat{r}) \right] du, \quad (2.37)$$

où nous avons noté $y = 1/k_F a$ et $\hat{r} = k_F r$. Naturellement, $n_\uparrow(\mathbf{r})$ ne dépend que de la norme de r par invariance par rotation du système. Nous observons à nouveau que cette densité est régulière à l'unitarité $1/k_F a = 0$. Plus précisément, nous obtenons alors $n_\uparrow(r) = n_\uparrow [1 + 3 \sin(2\hat{r})/(2\hat{r}^3)]$ où nous voyons apparaître explicitement les oscillations de Friedel à $2k_F$ [FW71]. Dans le cas général, cette intégrale ne peut pas être calculée analytiquement, mais son intégration numérique ne pose aucune difficulté. Nous représentons sur la figure 2.5 la densité locale pour différentes valeurs de $1/k_F a$.

2.2.3 Comparaison avec l'ansatz variationnel

Cette limite $m_\downarrow \rightarrow \infty$, pour laquelle il existe une solution exacte, nous permettra dans la prochaine section et dans le chapitre 5 de vérifier la convergence de nos approximations successives. Nous pouvons d'ores et déjà comparer la valeur du potentiel chimique donné par l'ansatz variationnel (2.9) à la solution analytique. À l'unitarité, l'expression (2.35) donne exactement $\mu_\downarrow = -1/2 E_F$, alors que la résolution de l'équation (2.18) fournit $\mu_\downarrow = -0.465 \mu_\uparrow$ et le développement à petit q (cf. équation (2.20)) donne $\mu_\downarrow = -0.402 \mu_\uparrow$. Ainsi, dans ce cas, l'erreur de l'ansatz variationnel est de seulement 7%. Nous remarquons également que le développement à petit q semble moins efficace que lorsque les masses sont égales. De plus, ce bon accord peut être vu sur la figure 2.6 où les deux courbes correspondant à la valeur exacte du potentiel chimique et au résultat donné par la résolution de l'équation (2.18) peuvent difficilement être distinguées.

Enfin, à l'aide de l'expression exacte (2.35), nous pouvons obtenir un développement du potentiel chimique dans la limite BCS, $a \rightarrow 0^-$:

$$\mu_\downarrow = \frac{2\pi a}{m_\uparrow} n_\uparrow - \frac{a^3 k_F^5}{6\pi m_\uparrow} + o(k_F a)^3, \quad (2.38)$$

et dans la limite BEC, $a \rightarrow 0^+$:

$$\mu_\downarrow = -\epsilon_b - E_F + \frac{2\pi a}{m_\uparrow} n_\uparrow - \frac{a^3 k_F^5}{6\pi m_\uparrow} + o(k_F a)^3. \quad (2.39)$$

Ainsi, dans la limite BCS nous voyons que le terme d'ordre 2 en $k_F a$ est nul, comme nous l'avons obtenu dans l'équation (2.22). Dans la limite BEC, le terme d'ordre 0 en $k_F a$ est correct dans ce cas particulier. Le terme d'ordre 1 n'est quant à lui pas décrit par l'ansatz variationnel, puisque dans le développement (2.25), il est le double du résultat exact. Enfin, remarquons que les équations (2.30) et (2.34) montrent que, dans ce cas particulier $m_\downarrow = \infty$, à l'exception des deux premiers termes dans la limite BEC, les développements pour $a \rightarrow 0^-$ et $a \rightarrow 0^+$ sont identiques.

2.3 Traitement à N-corps complet

2.3.1 Fonction d'onde et projection de l'équation de Schrödinger

Nous présentons dans cette section la théorie qui nous a permis d'éclaircir l'efficacité de cette première approche et d'obtenir une solution quasi-exacte du problème. Ainsi, inspirés par l'ansatz (2.9), nous décomposons en toute généralité la fonction d'onde du système considéré en prenant en compte un nombre croissant d'excitations de type paire particule-trou. Celle-ci s'écrit donc :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = & \alpha_0 b_{\mathbf{p}}^\dagger |0\rangle + \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}} |0\rangle + \dots \\ & + \frac{1}{(n!)^2} \sum'_{\{\mathbf{k}_i\}\{\mathbf{q}_j\}} \alpha_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j} b_{\mathbf{P}_\downarrow}^\dagger \prod_{i=1}^n c_{\mathbf{k}_i}^\dagger \prod_{j=1}^n c_{\mathbf{q}_j} |0\rangle + \dots \end{aligned} \quad (2.40)$$

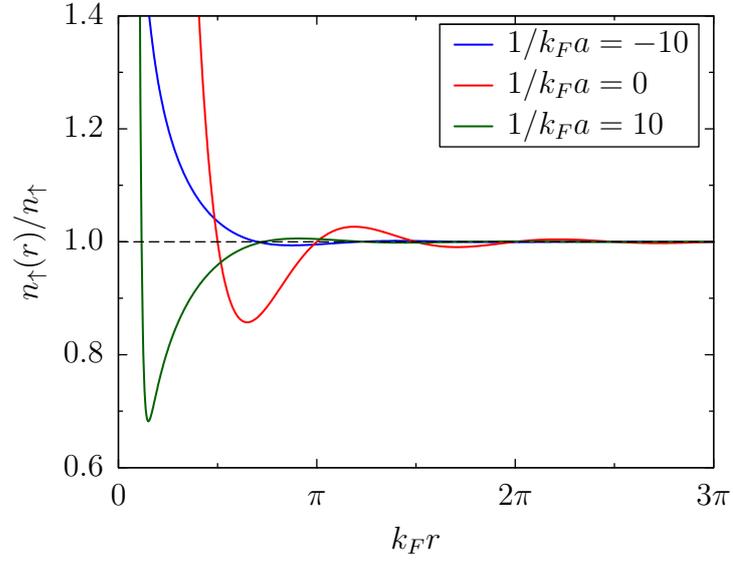


FIG. 2.5: Densité locale des atomes \uparrow en fonction de $k_F r$, lorsque $m_\downarrow = \infty$, pour différentes valeurs de l'interaction $1/k_F a$.

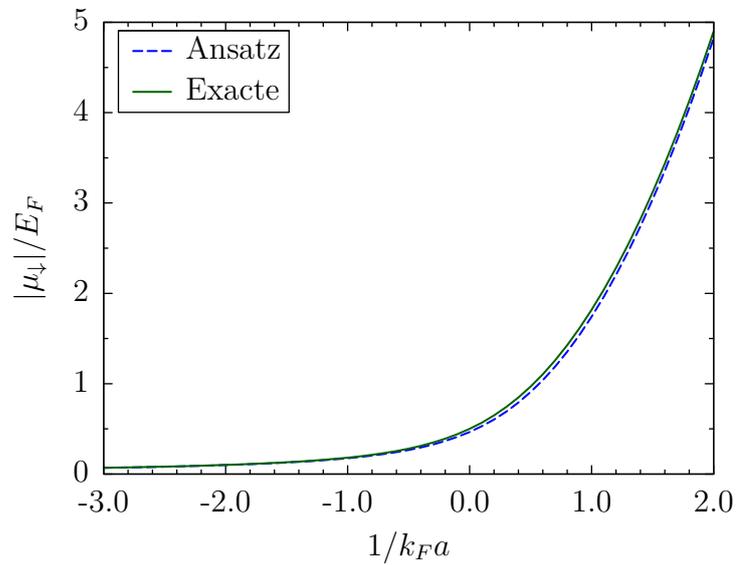


FIG. 2.6: Comparaison du potentiel chimique du polaron décrit par l'ansatz variationnel (2.9) avec la valeur exacte (cf. équation (2.35)), en fonction de $1/k_F a$ lorsque $m_\downarrow = \infty$.

où $|0\rangle = \prod_{k < k_F} c_{\mathbf{k}}^\dagger |vac\rangle$ désigne à nouveau la mer de Fermi d'atomes \uparrow . Les deux premiers termes sont les mêmes que ceux de l'équation (2.9), ils correspondent à la création de 0 et 1 paire particule-trou d'atomes \uparrow . Le terme général décrivant la création de n paires particule-trou fait naturellement intervenir n opérateurs de création $c_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ avec $k_i > k_F$ et n opérateurs de destruction $c_{\mathbf{q}_j}$ avec $q_j < k_F$, et nous avons donc utilisé la notation \sum' que nous avons introduite dans l'équation (2.9). Puisque nous cherchons un état propre avec une impulsion totale donnée, dans chacun des termes l'atome \downarrow porte l'impulsion restante pour que la somme des impulsions soit \mathbf{p} . Ainsi, l'argument de l'opérateur de création $b_{\mathbf{p}_\downarrow}^\dagger$ de l'atome \downarrow est $\mathbf{P}_\downarrow = \mathbf{p} + \sum_j^n \mathbf{q}_j - \sum_i^n \mathbf{k}_i$. Enfin, à cause des propriétés d'anticommuation des opérateurs $c_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ et $c_{\mathbf{q}_j}$, les coefficients $\alpha_{\mathbf{k}_i \mathbf{q}_j}$ (qui est une notation pour $\alpha_{\{\mathbf{k}_i, \mathbf{q}_j\}}$) sont antisymétriques sous l'échange de deux des vecteurs \mathbf{k}_i correspondant aux particules ou de deux des vecteurs \mathbf{q}_j correspondant aux trous. Puisqu'il y a $(n!)^2$ échanges possibles et que chacune de ces possibilités décrit en fait le même état physique, nous rajoutons le facteur $1/(n!)^2$ pour que $|\alpha_{\mathbf{k}_i \mathbf{q}_j}|^2$ mesure effectivement la probabilité d'occupation de cet état physique.

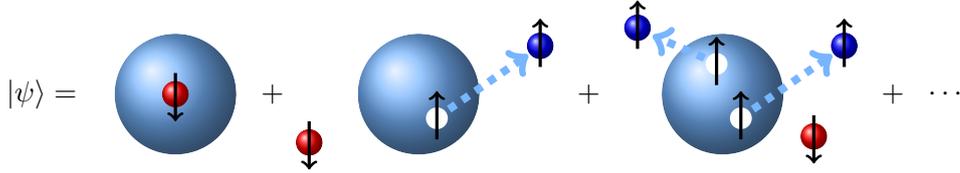


FIG. 2.7: Représentation graphique des différents termes intervenant dans le développement de la fonction d'onde (2.40) et correspondant à un nombre croissant de paires particule-trou.

Nous pouvons maintenant écrire l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ et projeter sur les sous-espaces à 0, 1, 2, ... paires particule-trou. Nous prenons à nouveau pour zéro d'énergie, l'énergie de la mer de Fermi E_{FS} , plus l'énergie de champ moyen gn_\uparrow qui tend vers 0 lorsque $g \rightarrow 0$. La projection sur $b_{\mathbf{p}}^\dagger|0\rangle$ nous donne la même équation que (2.10) :

$$E_{\mathbf{p}}\alpha_0 + g \sum'_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} = E\alpha_0, \quad (2.41)$$

où le premier terme correspond à l'énergie cinétique et le deuxième à la recombinaison d'une paire particule-trou. La projection sur $b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}}|0\rangle$ nous donne un terme supplémentaire par rapport à l'équation (2.11) :

$$(E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}}) \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} + g\alpha_0 + g \sum'_{\mathbf{K}} \alpha_{\mathbf{K}\mathbf{q}} - g \sum'_{\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{Q}} - g \sum'_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}} = E\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}. \quad (2.42)$$

Ici, le premier terme provient de l'énergie cinétique, le deuxième décrit la création d'une paire particule-trou à partir de l'état à 0 paire, le troisième et le quatrième la diffusion d'une particule de \mathbf{K} vers \mathbf{k} ou d'un trou de \mathbf{Q} vers \mathbf{q} , et le cinquième la recombinaison d'une paire (\mathbf{K}, \mathbf{Q}) à partir d'un état à 2 paires. De la même manière, en projetant sur

l'état à 2 paires $b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'-\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}'} |0\rangle$ nous trouvons :

$$\begin{aligned} & (E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'-\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{q}'}) \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} - g (\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} + \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} - \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} - \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}'}) \\ & + g \sum_{\mathbf{K}}' \alpha_{\mathbf{K}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} + g \sum_{\mathbf{K}}' \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'} - g \sum_{\mathbf{Q}}' \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{Q}\mathbf{q}'} - g \sum_{\mathbf{Q}}' \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{Q}} + g \sum_{\mathbf{K}\mathbf{Q}}' \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{Q}} \quad (2.43) \\ & = E \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} , \end{aligned}$$

où l'origine des différents termes peut s'interpréter facilement comme précédemment. Remarquons que l'antisymétrie de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ est satisfaite explicitement, de façon auto-cohérente, par cette équation. Nous obtenons ainsi un système infini d'équations couplées (chaque équation est couplée à la précédente et à la suivante) dont la résolution est équivalente à la résolution du problème à N corps. Nous pouvons écrire sans difficulté l'équation générale à l'ordre n , mais nous ne le ferons pas puisque nous verrons plus loin que cela est inutile. Rappelons que les différentes sommes sur \mathbf{K} sont divergentes puisque $\alpha_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j} \sim 1/k_i^2$. Pour calculer leur contribution, nous devons donc introduire une coupure k_c que nous faisons tendre vers l'infini, lorsque $g \rightarrow 0$. En comparaison, les sommes sur \mathbf{Q} qui sont limitées à $Q < k_F$ donnent une contribution nulle après multiplication par g , comme nous l'avons déjà remarqué avec l'ansatz (2.9). Enfin, puisque ce système est homogène, nous pouvons supposer par exemple que $\alpha_0 = 1$. Ainsi, en notant $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}^{(n)} = |E| + E_{\mathbf{p}+\sum_j \mathbf{q}_j - \sum_i \mathbf{k}_i} + \sum_i^n \epsilon_{\mathbf{k}_i} - \sum_j^n \epsilon_{\mathbf{q}_j}$, les équations à l'ordre 0, 1 et 2 s'écrivent :

$$-g^{-1} E_{\mathbf{p}}^{(0)} = \sum_{\mathbf{K}\mathbf{Q}}' \alpha_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} , \quad (2.44)$$

$$-g^{-1} E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = 1 + \sum_{\mathbf{K}}' \alpha_{\mathbf{K}\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{K}\mathbf{Q}}' \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{Q}} , \quad (2.45)$$

et

$$\begin{aligned} -g^{-1} E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} &= -\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} - \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} + \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} + \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \\ &+ \sum_{\mathbf{K}}' \alpha_{\mathbf{K}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{K}}' \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{K}\mathbf{Q}}' \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{Q}} . \end{aligned} \quad (2.46)$$

2.3.2 Découplage des équations

Nous observons que de manière générale, l'équation à l'ordre n est couplée à l'équation à l'ordre $n+1$ uniquement par une somme des coefficients $\alpha_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}$ d'ordre $n+1$. Nous pouvons donc résoudre au moins formellement ces équations en introduisant :

$$F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = g \sum_{\mathbf{K}}' \alpha_{\mathbf{K}\mathbf{q}} , \quad G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}') = g \sum_{\mathbf{K}}' \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'} , \quad \dots \quad (2.47)$$

comme nous l'avons fait dans la première section de ce chapitre. L'équation (2.44) s'écrit alors simplement :

$$E = E_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{q}}' F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) . \quad (2.48)$$

En particulier, nous voyons que la seule quantité dont nous avons besoin dans l'équation à l'ordre 1 (cf. équation (2.45)), provenant des sous-espaces avec 2 paires particule-trou ou plus, est $\sum'_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{Q}}$. Pour calculer cette somme, nous pouvons choisir, comme nous l'avons fait dans la première section, de négliger la dépendance en \mathbf{q} dans le terme $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}$ de l'équation (2.46), c'est-à-dire réaliser l'approximation $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \approx E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}\mathbf{0}}^{(2)}$. À nouveau, cette approximation est justifiée parce que nous avons $k, k' > k_F$ alors que $q, q' < k_F$, rendant négligeable, dans une grande partie du domaine d'intégration, l'énergie cinétique des trous par rapport à celle des particules. Dès lors, puisque $E^{(2)}$ ne dépend plus de \mathbf{q}' , nous pouvons sommer l'équation (2.46) sur \mathbf{q}' et nous obtenons dans le membre de gauche $-g^{-1} E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}\mathbf{0}}^{(2)} \sum'_{\mathbf{q}'} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}$. Dans le membre de droite, la contribution du sous-espace à 3 paires particule-trou devient $\sum'_{\mathbf{K}\mathbf{q}'\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{Q}}$. Or, par antisymétrie de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{Q}}$ sous l'échange de \mathbf{q}' et \mathbf{Q} , cette somme est *identiquement nulle* et ainsi, les trois premières équations deviennent entièrement découplées des sous-espaces avec 3 paires particule-trou ou plus. Il est important de noter que les coefficients $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{Q}}$ ne sont a priori pas négligeables, mais c'est un phénomène d'interférences dans la somme qui rend leur contribution nulle. Naturellement, il s'agit ici d'une approximation. Si nous tenons compte de la dépendance en les vecteurs d'onde des trous, l'interférence n'est plus parfaite et la contribution du sous-espace avec 3 paires particule-trou n'est plus nulle, mais reste petite. Ceci constitue la propriété essentielle de notre développement.

Remarquons que pour mieux tenir compte de la dépendance en \mathbf{q} , nous pouvons choisir de remplacer uniquement \mathbf{q}' par $\mathbf{0}$ dans $E^{(2)}$, c'est-à-dire réaliser l'approximation $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \approx E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{0}}^{(2)}$. À nouveau, nous pouvons alors sommer l'équation (2.46) sur \mathbf{q}' et l'argument reste valide : l'interférence est totale et le sous-espace avec 3 paires particule-trou ne contribue pas. Ceci renforce l'idée que dans la solution exacte, cette contribution est petite. Nous pouvons donc choisir de ne pas négliger la dépendance en \mathbf{q} et \mathbf{q}' , mais simplement omettre le dernier terme de l'équation (2.46). Dans ce cas, de la même manière que dans la première section, cela revient à restreindre l'espace de Hilbert à au plus deux excitations particule-trou. Le résultat que nous obtenons est donc variationnel, il fournit une borne supérieure pour la valeur de l'énergie.

L'argumentation que nous avons développée ici à l'ordre 2, est en fait valable à n'importe quel ordre. En particulier, si nous l'appliquons à l'équation à l'ordre 1 (cf. équation (2.45)), nous voyons qu'en négligeant la dépendance en \mathbf{q} de $E^{(1)}$ comme nous l'avons fait dans la première section, les interférences annulent la contribution du sous-espace à deux paires particule-trou. Or, nous avons effectivement remarqué que cette approximation donnait déjà des résultats satisfaisants. Enfin, si nous l'appliquons à l'ordre n , nous obtenons un découplage par rapport aux sous-espaces avec $n+1$ paires, et le système infini d'équations devient un système fermé de $n+1$ équations couplées. Nous mettons ainsi en évidence une série d'approximations successives dont la convergence vers la solution exacte se révèle être très rapide, à cause du phénomène d'interférences. Ceci nous permet de comprendre l'efficacité de l'ansatz variationnel (2.9), puisqu'il s'agit simplement de la première étape de ce développement. En pratique, la convergence rapide de cette procédure nous permet d'obtenir de manière très contrôlée la solution du problème avec la précision souhaitée. Plus précisément, nous montrerons à la fin de cette section que le calcul avec au plus deux paires particule-trou est suffisant pour ce qui nous intéresse : ce sera donc l'approximation la plus précise que nous considérerons à partir de maintenant.

Comme nous l'avons fait dans la première section, nous pouvons alors éliminer la constante de couplage g et réduire le nombre de variables intervenant dans les équations (2.44) à (2.46) en utilisant les fonctions $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ et $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$. Ainsi, nous pouvons écrire l'équation (2.45) sous la forme :

$$\alpha_{\mathbf{kq}} = -\frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}} \left[g + F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) - \sum_{\mathbf{q}'} G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}') \right], \quad (2.49)$$

qui est analogue à l'équation (2.15). Nous pouvons ensuite sommer sur \mathbf{k} et utiliser la relation (1.28) reliant g à la longueur de diffusion a . Nous obtenons :

$$F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) \left[\frac{m_r}{2\pi a} - \frac{m_r k_F}{\pi^2} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}} - \frac{2m_r}{k^2} \right) \right] = 1 + \sum_{\mathbf{kq}'} \frac{G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')}{E_{\mathbf{p},\mathbf{kq}}^{(1)}}, \quad (2.50)$$

où le crochet est identique à celui de l'équation (2.16) et peut donc être calculé analytiquement. De la même manière, en divisant l'équation (2.46) par $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}$, nous obtenons :

$$\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} = -\frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}} [g(-\alpha_{\mathbf{kq}} - \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} + \alpha_{\mathbf{kq}'} + \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}}) - G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{q}') + G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')], \quad (2.51)$$

où nous avons utilisé l'antisymétrie de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ pour exprimer la première somme sur \mathbf{K} en fonction de $G_{\mathbf{p}}$. En sommant sur \mathbf{k}' et en regroupant les termes faisant intervenir $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$ dans le membre de gauche, il vient alors :

$$G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}') \left[g^{-1} + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}} \right] = -g \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} - \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'}}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}} - g \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}} (\alpha_{\mathbf{kq}'} - \alpha_{\mathbf{kq}}) + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{q}')}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}}. \quad (2.52)$$

Dans le membre de droite, nous avons séparé les contributions provenant du sous-espace à 1 paire dépendant de \mathbf{k}' de celles qui n'en dépendent pas. En effet, comme $\alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sim 1/k'^2$ pour $k' \rightarrow \infty$, nous voyons que la première somme sur \mathbf{k}' est convergente et donne donc une contribution nulle après multiplication par $g \rightarrow 0$. Au contraire, la seconde somme est divergente et sa contribution peut être obtenue en utilisant pour $k' \rightarrow \infty$, $1/E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \sim 2m_r/k'^2$. Comme pour $E^{(1)}$, nous trouvons que $-g \sum_{\mathbf{k}'} 1/E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} = 1$. En utilisant à nouveau la relation (1.28) pour éliminer la constante de couplage au profit de la longueur de diffusion a , nous obtenons donc :

$$G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}') \left[\frac{m_r}{2\pi a} - \frac{m_r k_F}{\pi^2} + \sum_{\mathbf{k}'} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}} - \frac{2m_r}{k'^2} \right) \right] = \alpha_{\mathbf{kq}'} - \alpha_{\mathbf{kq}} + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{q}')}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}}. \quad (2.53)$$

Le crochet du membre de gauche peut également être calculé analytiquement et son expression se déduit facilement de celle de T_2 que nous donnons dans l'équation (5.20). Re-

marquons enfin que dans le membre de droite de cette équation intégrale, le terme source $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} - \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ dépend de la fonction $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$ puisqu'il est donné par l'équation (2.49) où nous avons pris la limite $g \rightarrow 0$, c'est-à-dire :

$$\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = \frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}} \left[-F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) + \sum'_{\mathbf{q}'} G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}') \right]. \quad (2.54)$$

2.3.3 Résolution numérique

Pour appliquer notre procédure d'approximations successives à l'ordre 2, nous devons résoudre les équations couplées (2.48), (2.50), (2.53) et (2.54). Ces équations constituent en fait une équation implicite pour l'énergie de la quasi-particule $E[\mathbf{p}]$ puisqu'elle intervient à la fois dans le membre de gauche de l'équation (2.48) et dans les différents facteurs $E^{(1)}$ et $E^{(2)}$. La méthode générale de résolution est donc la même que pour l'ansatz variationnel (2.9) : pour une valeur donnée de E que nous utilisons dans les expressions de $E^{(1)}$ et $E^{(2)}$, nous calculons une nouvelle valeur de l'énergie à l'aide de l'équation (2.48), puis ajustons la valeur trouvée à l'aide d'une méthode classique de résolution numérique d'équation (dichotomie, Newton, ...). Ainsi, nous devons résoudre, pour une valeur donnée de E , le système formé des trois équations (2.50), (2.53) et (2.54).

En remplaçant $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ et $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ par leur expression en fonction de $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$, ce système se ramène en fait à une équation intégrale pour la fonction de 3 variables d'espace $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$. Lorsque le paramètre \mathbf{p} est nul (pour le calcul du potentiel chimique), l'invariance par rotation du système réduit ce nombre à 6 variables réelles. Par contre, lorsque $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$ (pour le calcul de la masse effective), il y a alors 8 variables réelles indépendantes. Les différentes intégrales qui interviennent sont discrétisées à l'aide de méthodes usuelles de quadrature. Plus précisément, nous utilisons des méthodes de Simpson ouvertes pour les normes des vecteurs, la méthode de Gauss-Legendre pour l'angle zénithal θ et une méthode des rectangles pour l'angle azimutal φ (qui est particulièrement adaptée aux fonctions périodiques régulières). Le nombre important de variables impose de limiter le nombre de points de discrétisation pour garder un coût mémoire raisonnable. Nous avons cependant vérifié à l'aide d'une étude détaillée de la convergence que le nombre de points que nous utilisons est suffisant pour atteindre la précision souhaitée. Précisons qu'il est en pratique impossible de stocker en mémoire le noyau de cette équation intégrale. En effet, lorsque $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$, il s'agit d'une matrice dont la taille est de l'ordre de $N^8 \times N^8$ où N est le nombre de points utilisés pour une quadrature.

Il s'est donc avéré plus judicieux de procéder par itérations successives. En pratique, il est même plus efficace de garder l'équation sous la forme du système des 3 équations couplées (2.50), (2.53) et (2.54). Voici les différentes étapes de la résolution. Nous commençons par la valeur de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ donnée par l'ansatz variationnel (2.9) et effectuons 5 itérations de l'équation intégrale (2.53) en utilisant une méthode d'extrapolation de Richardson à chaque itération. Plus précisément, au cours d'une itération, au lieu d'utiliser uniquement la valeur à l'itération précédente de la fonction $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$, nous utilisons une combinaison judicieuse des deux valeurs précédentes. Nous mettons ensuite à jour les valeurs de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ et $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ à l'aide des équations (2.50) et (2.54). Indiquons cependant une difficulté supplémentaire. L'équation (2.54) fournit naturellement la valeur de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$

sur la grille de discrétisation des vecteurs \mathbf{k} et \mathbf{q} . Or, dans l'équation (2.53), nous voyons que nous avons également besoin de la valeur de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}'}$ et la grille de discrétisation du couple $(\mathbf{k}, \mathbf{q}')$ n'est pas la même que celle du couple (\mathbf{k}, \mathbf{q}) . Pour résoudre cette difficulté, nous effectuons une interpolation sur l'angle entre les vecteurs \mathbf{k} et \mathbf{q} à l'aide d'une décomposition sur les polynômes de Legendre (nous avons également utilisé des splines cubiques, mais cela se révèle être moins efficace). Dès lors, nous effectuons à nouveau 5 itérations (avec extrapolation) de l'équation intégrale (2.53) avec ce nouveau second membre, avant de remettre à jour la valeur de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$. Nous réalisons ainsi 7 mises à jour de $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ avec également des extrapolations intermédiaires. Nous utilisons alors la valeur de $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$ obtenue pour calculer $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ à l'aide de l'équation (2.50) puis l'énergie de la quasi-particule $E[\mathbf{p}]$ à l'aide de (2.48).

Indiquons que cette procédure relativement complexe résulte d'une étude approfondie de la convergence. Elle nous a permis d'optimiser à la fois la précision et le temps de calcul de nos simulations (le code tourne en moins de 10 heures sur un simple ordinateur de bureau pour le calcul de μ_{\downarrow}). Cette étude de la convergence a notamment été réalisée lorsque $m_{\downarrow} = \infty$, puisque la solution exacte est alors connue. Elle a été rendue nécessaire par la proximité des résultats avec la solution exacte. En effet, une procédure numérique un peu maladroite peut facilement donner une valeur de μ_{\downarrow} algébriquement inférieure à la valeur exacte, alors qu'il s'agit d'un calcul variationnel!

2.3.4 Résultats

Nous avons d'abord vérifié la convergence de notre série d'approximations successives lorsque $m_{\downarrow} = \infty$ en comparant nos résultats à la solution exacte que nous avons obtenue dans la section précédente. Numériquement, la situation est dans ce cas plus simple, puisque les différentes fonctions ne dépendent alors plus que de la norme des vecteurs et il n'y a aucune intégration angulaire à réaliser. Ainsi, pour le calcul du potentiel chimique, nous passons d'une équation intégrale à 6 variables réelles à une équation avec seulement 3 variables réelles. Rappelons qu'à l'unitarité $1/k_F a = 0$, la solution exacte est $\mu_{\downarrow} = -1/2 E_F$ et le résultat à l'ordre 1 est $\mu_{\downarrow} = -0.465 E_F$. Bien qu'étant relativement proche de la solution exacte, ce résultat n'est pas aussi bon que pour des masses égales. En effet, nous avons vu dans la première section que la convergence du développement en fonction du vecteur d'onde du trou \mathbf{q} est ici moins rapide. À l'ordre 2, si nous effectuons l'approximation $E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \approx E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}\mathbf{0}}^{(2)}$ dans l'équation (2.46) (ou de manière équivalente dans l'équation (2.53)), nous obtenons $\mu_{\downarrow} = -0.481 E_F$. Si nous prenons mieux en compte la dépendance en \mathbf{q} en remplaçant seulement \mathbf{q}' par $\mathbf{0}$ $E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \approx E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{0}}^{(2)}$, ce résultat s'améliore en $\mu_{\downarrow} = -0.487 E_F$. Enfin, sans approximation sur $E^{(2)}$ mais en négligeant la contribution du sous-espace à 3 paires particule-trou, c'est-à-dire en résolvant de manière exacte l'équation (2.53), nous trouvons $\mu_{\downarrow} = -0.498 E_F$ (qui, rappelons-le, est un résultat variationnel). Cette valeur correspond à une erreur relative de seulement 0.4%. Elle montre explicitement qu'à l'ordre 2 notre série d'approximations a déjà essentiellement convergé vers la solution exacte du problème, alors même que nous avons montré que la convergence est moins rapide dans cette situation où $m_{\downarrow} = \infty$. Enfin, nous avons également considéré la situation en dehors de l'unitarité. Si nous rajoutons la courbe correspondante sur la figure 2.6, il est impossible de la distinguer de la solution exacte.

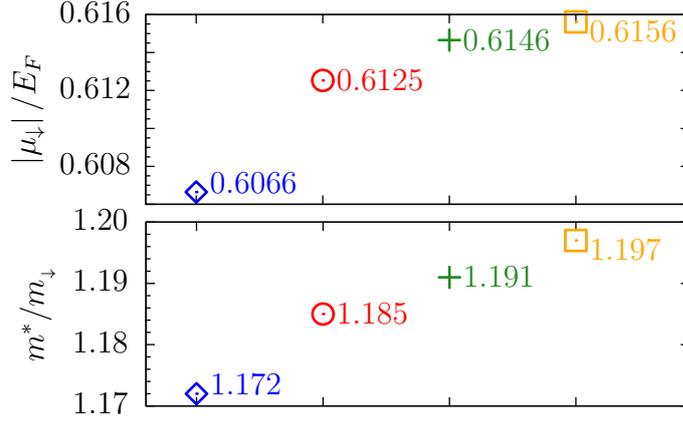


FIG. 2.8: Potentiel chimique et masse effective du polaron à l'unitarité, lorsque $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$, correspondant à notre série d'approximations successives [CG08]. Losange : ordre 1, ansatz (2.9). Rond : ordre 2 avec $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \approx E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}\mathbf{0}}$. Croix : ordre 2 avec $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \approx E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{0}}$. Carré : ordre 2 sans approximation (variationnel).

Nous avons également étudié l'erreur relative de notre approximation en fonction de l'interaction $1/k_F a$ et trouvé que c'est exactement à l'unitarité $1/k_F a = 0$ qu'elle est la plus grande. Cela est raisonnable puisque, dans la limite de couplage faible $a \rightarrow 0^-$, le développement de la fonction d'onde que nous utilisons coïncide avec celui donné par un calcul en théorie des perturbations et, dans la limite BEC, nous avons déjà remarqué que notre résultat pour μ_{\downarrow} est exact jusqu'à l'ordre 0 en $k_F a$ (au moins) alors que le terme dominant $-\epsilon_b$ tend vers $-\infty$.

Une autre situation pour laquelle la solution exacte est connue est le cas de la dimension 1 lorsque les masses sont égales $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$. Nous avons donc également pu vérifier la convergence de notre série d'approximations dans ce cas particulier. Cela constitue une partie de l'étude réalisée dans le chapitre suivant.

Nous avons ensuite appliqué notre procédure au problème initial qui nous intéressait, c'est-à-dire à la situation des masses égales en dimension 3. Nos résultats sont représentés sur la figure 2.8. Rappelons qu'à l'unitarité le résultat à l'ordre 1 était $\mu_{\downarrow} = -0.6066 E_F$ et qu'un développement à l'ordre 2 en \mathbf{q} de $E_{\mathbf{0},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$ nous avait donné $\mu_{\downarrow} = -0.5985 E_F$ (cf. équation (2.20)). À l'ordre 2, si nous effectuons l'approximation $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \approx E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}\mathbf{0}}$, le résultat est $\mu_{\downarrow} = -0.6125 E_F$. Cette valeur devient $\mu_{\downarrow} = -0.6146 E_F$ avec seulement l'approximation $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \approx E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{0}}$. Enfin, le résultat exact du calcul variationnel est $\mu_{\downarrow} = -0.6156 E_F$. Ainsi, nous retrouvons dans ce cas l'efficacité du développement en \mathbf{q} , ce qui implique, comme nous l'avons vu, une convergence très rapide de nos approximations successives en fonction du nombre de paires particule-trou considérées. Il est donc très probable que notre résultat à l'ordre 2 est essentiellement exact. Plus précisément, nous voyons que la correction relative apportée par l'ordre 2 est d'environ 10^{-2} . Il semble donc raisonnable de penser que la correction apportée par l'ordre 3 sera inférieure à 10^{-4} , et nous pouvons ainsi affirmer que la valeur exacte du potentiel chimique est au plus $\mu_{\downarrow} = -0.6158 E_F$. Bien sûr, en pratique, la précision de cette valeur va largement

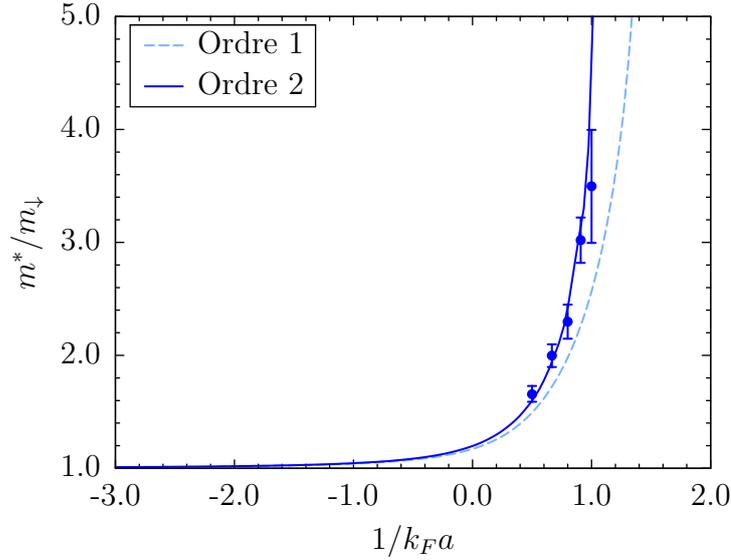


FIG. 2.9: Masse effective du polaron à l'ordre 1 en tirets clairs et à l'ordre 2 en trait plein en fonction de $1/k_F a$ lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow$. Les points avec barres d'erreur correspondent aux calculs de type Monte-Carlo Diagrammatique réalisés par Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a].

au-delà de ce qu'on peut espérer mesurer expérimentalement pour l'instant. En effet, la première mesure expérimentale a été réalisée récemment au MIT avec des atomes de ${}^6\text{Li}$ par Schirotzek *et al.* [SWSZ09] et elle a permis d'obtenir $\mu_\downarrow = -0.64(7) E_F$ ou $\mu_\downarrow = -0.72(9) E_F$ en fonction de l'état hyperfin utilisé pour l'impureté. Cette précision a cependant été rendue nécessaire pour comprendre l'efficacité de l'ansatz variationnel (2.9) et montrer que nous avons effectivement atteint la solution exacte de ce problème. Enfin, indiquons que notre résultat final est en très bon accord avec les calculs de type Monte-Carlo Diagrammatique réalisés par Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a], puisqu'ils avaient obtenu $\mu_\downarrow = -0.615 E_F$ ou $\mu_\downarrow = -0.618 E_F$. Il confirme également la relative imprécision des calculs de type Fixed-Node réalisés par Pilati et Giorgini [PG08].

Enfin, nous avons calculé la masse effective du polaron à l'unitarité lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow$, en appliquant notre série d'approximations successives. Les résultats sont indiqués sur la figure 2.8. Rappelons que le traitement numérique est dans ce cas plus complexe puisque nous perdons l'invariance par rotation et l'équation intégrale fait alors intervenir 8 variables réelles. Ainsi, la troisième décimale indiquée sur la figure 2.8 ne doit pas être tenue pour certaine, son rôle est uniquement de montrer clairement la tendance. À l'ordre 2, nous trouvons $m^* = 1.20 m_\downarrow$. Puisque cette valeur est obtenue à l'aide de la différence entre l'énergie $E[\mathbf{p}]$ pour $p = 0.1 k_F$ et le potentiel chimique $\mu_\downarrow = E[\mathbf{0}]$, notre précision pour le calcul de $E[\mathbf{p}]$ nous donne une incertitude de $\pm 0.02 m_\downarrow$ pour la masse effective. Ainsi, le désaccord avec les calculs Monte-Carlo de type Fixed-Node qui ont donné $m^* = 1.04(3) m_\downarrow$ [LRGS06] ou $m^* = 1.09(2) m_\downarrow$ [PG08] est confirmé. Indiquons qu'expérimentalement, une première valeur de la masse effective m^* avait été déduite de l'analyse de profils de densité [Shi08]. Plus récemment, l'étude des modes collectifs d'oscillation d'un gaz de ${}^6\text{Li}$ polarisé dans le groupe de C. Salomon et F. Chevy

à l'ENS [NNJ⁺09] a permis de réaliser la première mesure dynamique de m^* . Ils ont obtenu $m^* = 1.17(10) m_\downarrow$. La précision de cette mesure a ensuite été fortement améliorée par le même groupe à l'aide d'une expérience astucieuse permettant un accès direct à l'équation d'état [NNJ⁺10]. Leur résultat $m^* = 1.20(2) m_\downarrow$ est en excellent accord avec notre prédiction théorique et invalide la valeur fournie par les calculs de type Fixed-Node [PG08]. Nous avons également considéré la situation en dehors de l'unitarité et représenté les résultats sur la figure 2.9. Nous observons que lorsque nous allons du côté BEC, la masse effective devient naturellement plus sensible à notre approximation puisque de plus en plus d'atomes \uparrow habillent l'atome \downarrow . Nous avons également représenté sur cette figure les résultats obtenus par Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a]. La convergence de leurs calculs Monte-Carlo est aussi plus difficile lorsque la valeur de $1/k_F a$ se rapproche de 1. Remarquons que nos résultats sont toujours dans leurs barres d'erreur, à l'exception du dernier point pour $1/k_F a = 1$ qui est légèrement au-dessus. Cependant, au cours d'une communication privée, B. Svistunov a reconnu que l'estimation de ces barres d'erreur n'est pas très précise.

Nous concluons ce chapitre en revenant sur la nature du développement que nous avons mis en place et qui nous a permis d'aboutir à une solution quasi-exacte de ce problème. Il est important de noter que contrairement aux éventuelles apparences, ce calcul n'est pas un calcul perturbatif. Il n'y a réellement aucun petit paramètre qui pourrait justifier un tel développement. En effet, le seul paramètre du problème est ici le produit $k_F a$ et ce paramètre est en fait infini à l'unitarité, alors que nous avons clairement mis en évidence la convergence rapide de notre développement. Ainsi, la situation doit plutôt être comparée à une série rapidement convergente, comme cela est le cas par exemple pour la série donnant la valeur de $e^1 = \sum_n 1/n!$. Dans notre cas, l'entier n est simplement le nombre de paires particule-trou considérées, et nous avons montré explicitement que notre série converge très rapidement (et même plus rapidement que $\sum_n 1/n!$), de sorte qu'en la tronquant à $n = 2$ nous obtenons un résultat dont la précision va largement au-delà de ce qu'on peut espérer expérimentalement.

Le problème à $N+1$ corps en dimension 1

Nous nous intéressons dans ce chapitre à l'étude du problème à $N + 1$ corps en dimension 1, qui avait été suggérée dans [CRLC07] et a fait l'objet de l'article [GC09]. La situation est alors naturellement plus simple, aussi bien analytiquement que numériquement. Après avoir indiqué comment il est possible de réaliser expérimentalement ce type de système avec des gaz d'atomes ultrafroids, nous utilisons le développement de la fonction d'onde que nous avons introduit dans le chapitre précédent. Nous nous intéressons ensuite plus particulièrement à la situation des masses égales pour laquelle une solution exacte a été obtenue par McGuire [McG65, McG66] à l'aide de l'ansatz de Bethe. Nous pouvons ainsi vérifier à nouveau la convergence très rapide de notre série d'approximations successives. Nous calculons alors, comme nous l'avons fait en dimension 3, la solution exacte lorsque l'impureté a une masse infinie. Enfin, nous revenons au cas général et étudions les résultats fournis par notre approximation.

3.1 Introduction

3.1.1 L'Hamiltonien du système

Nous considérons un système de N fermions de spin \uparrow et de masse m_\uparrow interagissant en dimension 1 avec un unique fermion de spin \downarrow et de masse m_\downarrow . La densité des atomes \uparrow s'écrit alors $n_\uparrow = k_F/\pi$, où k_F est le vecteur d'onde de Fermi des atomes \uparrow . Nous supposons de plus que le potentiel d'interaction est un potentiel de contact de constante de couplage g . L'Hamiltonien s'écrit donc :

$$H = -\frac{1}{2m_\uparrow} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_{i\uparrow}^2} - \frac{1}{2m_\downarrow} \frac{\partial^2}{\partial x_\downarrow^2} + g \sum_{i=1}^N \delta(x_{i\uparrow} - x_\downarrow), \quad (3.1)$$

ou en seconde quantification :

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_P E_P b_P^\dagger b_P + g \sum_{kk'PP'} \delta_{kk'PP'} c_k^\dagger c_{k'} b_P^\dagger b_{P'}, \quad (3.2)$$

où nous avons noté comme précédemment $\epsilon_k = k^2/2m_\uparrow$, $E_P = P^2/2m_\downarrow$, $\delta_{kk'PP'} = \delta_{k+P,k'+P'}$ et c_k , c_k^\dagger les opérateurs de destruction et de création pour les atomes \uparrow et b_P , b_P^\dagger ceux de l'atome \downarrow .

Indiquons que contrairement à la dimension 3, le potentiel d'interaction en δ est mathématiquement bien défini, il est inutile d'introduire une coupure pour le régulariser. Plus précisément, la constante de couplage g ne tend plus vers 0 ; c'est un vrai paramètre physique : elle est négative si le potentiel est attractif ou positive s'il est répulsif. Nous pouvons la relier à la longueur de diffusion à une dimension a de la manière suivante. Les états de diffusion de ce potentiel sont obtenus par résolution de l'équation de Schrödinger à un corps :

$$-\frac{1}{2m_r}\varphi''(x) + g\delta(x)\varphi(x) = \frac{k^2}{2m_r}\varphi(x). \quad (3.3)$$

où nous avons isolé la partie correspondant au mouvement relatif et noté m_r la masse réduite. Cette équation possède des solutions paires ou impaires. Les fonctions d'onde impaires ne sentent pas le potentiel puisqu'elles sont nulles en $x = 0$. Elles sont données par :

$$\varphi_k^-(x) = A_k^- \sin(kx). \quad (3.4)$$

Les fonctions d'onde paires s'écrivent :

$$\varphi_k^+(x) = A_k^+ \cos(k|x| + \delta(k)), \quad (3.5)$$

où le déphasage $\delta(k)$ est obtenu à partir de la discontinuité imposée par le potentiel de contact :

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = 2m_r g \varphi(0). \quad (3.6)$$

Nous obtenons $\cot \delta(k) = -k/(m_r g)$. Dans la limite des faibles énergies $k \rightarrow 0$, nous avons donc $\delta(k) = -\pi/2 + k/(m_r g) + o(k)$, puis $\varphi_k^+(x) = A_k^+ k(|x| + 1/(m_r g))$. Par analogie avec le cas de la dimension 3, nous pouvons donc définir une longueur de diffusion $a = -1/(m_r g)$ correspondant à la position du nœud de la fonction d'onde. Nous avons alors :

$$\cot \delta(k) = ka, \quad a = -\frac{1}{m_r g}. \quad (3.7)$$

Ainsi, contrairement à la dimension 3, la constante de couplage est inversement proportionnelle à la longueur de diffusion. Le régime de couplage faible $g \rightarrow 0$ correspond donc à la situation où la longueur de diffusion diverge. De plus, lorsque $a < 0$, le potentiel d'interaction est désormais répulsif. Indiquons une autre propriété importante : dès que $a > 0$ ($g < 0$), ce potentiel d'interaction possède un unique état lié. En effet, l'équation :

$$-\frac{1}{2m_r}\varphi''(x) + g\delta(x)\varphi(x) = -\frac{\kappa^2}{2m_r}\varphi(x), \quad (3.8)$$

admet alors pour solution :

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}, \quad \kappa = 1/a, \quad (3.9)$$

et l'énergie de cet état lié est $-\epsilon_b = -1/2m_r a^2 = -m_r g^2/2$.

3.1.2 Réalisation expérimentale

Jusqu'à récemment, l'Hamiltonien à une dimension (3.1) avait fait l'objet de nombreuses études qui étaient uniquement théoriques puisqu'aucun système expérimental ne pouvait permettre de vérifier ces prédictions. Les progrès impressionnants réalisés au cours des dix dernières années dans le domaine des gaz de Fermi ultrafroids fournissent un réel espoir pour étudier expérimentalement ces systèmes. En effet, Olshanii [Ols98] et Bergeman *et al.* [BMO03] ont montré que le gaz de Fermi 1D pouvait être réalisé en confinant les atomes dans un piège fortement anisotrope. Si nous écrivons le potentiel de piégeage sous la forme :

$$V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2, \quad (3.10)$$

avec $r_{\perp} = \sqrt{x^2 + y^2}$ et supposons que l'anisotropie $\lambda = \omega_z/\omega_{\perp}$ est petite, à basse température seul le mode transverse de plus basse énergie est occupé. Les degrés de liberté transverses sont donc figés et le système se comporte comme un système à une dimension. Plus précisément, l'énergie de Fermi $E_F \simeq N_{\uparrow}\omega_z$ de l'espèce majoritaire qui caractérise le mouvement longitudinal doit être très inférieure à la différence entre les niveaux d'énergie de la direction transverse $E_F \ll \omega_{\perp}$, ou de manière équivalente $\lambda \ll 1/N_{\uparrow}$. Dans ce cas, Olshanii [Ols98] a montré que l'interaction entre deux atomes de spins différents est décrite par un potentiel de contact $g\delta(x_{\uparrow} - x_{\downarrow})$ dont la constante de couplage g est donnée par :

$$g = \frac{2a_{3D}}{ma_{\perp}^2} \frac{1}{1 - Aa_{3D}/a_{\perp}}, \quad (3.11)$$

où a_{3D} est la longueur de diffusion en dimension 3, $a_{\perp} = 1/\sqrt{m\omega_{\perp}}$ la longueur caractéristique de l'oscillateur harmonique transverse et $A = |\zeta(1/2)|/\sqrt{2} = 1.0326$. En particulier, l'interaction effective est attractive si $0 < 1/a_{3D} < A/a_{\perp}$. En se plaçant au voisinage d'une résonance de Feshbach, il est possible de faire varier a_{3D} en fonction du champ magnétique appliqué, et donc de faire varier g de $-\infty$ à $+\infty$ et réaliser ainsi l'analogie de la transition BEC-BCS en dimension 3 [ABGP04, FRZ04, Tok04, MKEG05].

3.1.3 Application du développement paires particule-trou

Nous pouvons désormais appliquer le développement que nous avons introduit en dimension 3 dans le chapitre précédent. Ainsi, pour un état d'impulsion total p , nous décomposons la fonction d'onde sous la forme :

$$|\psi\rangle = \alpha_0 b_p^{\dagger} |0\rangle + \sum'_{kq} \alpha_{kq} b_{p+q-k}^{\dagger} c_k^{\dagger} c_q |0\rangle + \frac{1}{4} \sum'_{kk'qq'} \alpha_{kk'qq'} b_{p+q+q'-k-k'}^{\dagger} c_k^{\dagger} c_k^{\dagger} c_q c_{q'} |0\rangle, \quad (3.12)$$

où, comme précédemment, $|0\rangle = \prod_{|q| < k_F} c_q^{\dagger} |vac\rangle$ désigne la mer de Fermi d'atomes \uparrow et nous avons utilisé la notation \sum' pour indiquer que les sommes sont limitées à $|q| < k_F$ et $|k| > k_F$. Par simplicité, nous nous sommes limités à une fonction d'onde faisant intervenir des états avec au plus deux paires particule-trou, puisque nous voulons tester ici la qualité de cette approximation. Rappelons que les coefficients $\alpha_{kk'qq'}$ sont antisymé-

triques ($\alpha_{kk'qq'} = -\alpha_{k'kqq'} = -\alpha_{kk'q'q} = \alpha_{k'kq'q}$) et que le facteur $1/4$ permet de corriger la présence multiple du même état.

Nous écrivons ensuite l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ et projetons sur les sous-espaces à 0, 1 et 2 paires particule-trou pour obtenir des équations tout à fait similaires aux équations (2.44), (2.45) et (2.46) :

$$-g^{-1}E_p^{(0)} = \sum'_{KQ} \alpha_{KQ}, \quad (3.13)$$

$$-g^{-1}E_{p,kq}^{(1)} \alpha_{kq} = 1 + \sum'_{K} \alpha_{Kq} - \sum'_{Q} \alpha_{kQ} - \sum'_{KQ} \alpha_{kKqQ}, \quad (3.14)$$

et

$$\begin{aligned} -g^{-1}E_{p,kk'qq'}^{(2)} \alpha_{kk'qq'} = & -\alpha_{kq} - \alpha_{k'q'} + \alpha_{kq'} + \alpha_{k'q} \\ & + \sum'_{K} \alpha_{Kk'qq'} + \sum'_{K} \alpha_{kKqq'} - \sum'_{Q} \alpha_{kk'Qq'} - \sum'_{Q} \alpha_{kk'qQ}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

À nouveau, nous avons supposé $\alpha_0 = 1$ puisqu'il s'agit d'un système homogène. Indiquons cependant quelques différences importantes par rapport aux équations que nous avons obtenues en dimension 3. Tout d'abord, comme la constante de couplage g ne tend plus vers 0, le terme de champ moyen gn_{\uparrow} n'est plus nul et les expressions de $E^{(n)}$ sont légèrement différentes. Nous avons : $E_p^{(0)} = -E + gn_{\uparrow} + E_p$, $E_{p,kq}^{(1)} = -E + gn_{\uparrow} + E_{p+q-k} + \epsilon_k - \epsilon_q$ et $E_{p,kk'qq'}^{(2)} = -E + gn_{\uparrow} + E_{p+q+q'-k-k'} + \epsilon_k + \epsilon_{k'} - \epsilon_q - \epsilon_{q'}$. Dans ces expressions, E désigne l'énergie mesurée à partir de l'énergie de la mer de Fermi d'atomes \uparrow sans interaction : $E_{\text{FS}} = \sum_{|q| < k_F} \epsilon_q = 1/3 NE_F$. Le potentiel chimique μ_{\downarrow} est obtenu pour $p = 0$ et le comportement de E à petit p donne la masse effective. Remarquons que lorsque $g > 0$ ($a < 0$), μ_{\downarrow} est attendu positif puisque l'interaction est répulsive. Comme nous avons restreint l'espace de Hilbert aux états contenant au plus deux paires, ces 3 équations sont naturellement découplées des suivantes et fournissent un résultat variationnel. Enfin, les sommes sur K sont désormais convergentes et les sommes sur Q donnent des contributions non nulles (même après multiplication par g , puisque $g \not\rightarrow 0$). Par conséquent, nous ne pouvons pas réduire le nombre de variables comme nous l'avons fait en dimension 3 en introduisant les fonctions $F_{\mathbf{p}}$ et $G_{\mathbf{p}}$, mais devons résoudre les équations (3.13) à (3.15) où les fonctions inconnues sont α_{kq} et $\alpha_{kk'qq'}$. Cependant, comme nous sommes en dimension 1, l'équation pour $\alpha_{kk'qq'}$ est une équation intégrale faisant intervenir seulement 4 variables réelles. En pratique, nous procédons à nouveau par itérations en utilisant des méthodes d'accélération de la convergence et en mettant à jour le terme source de l'équation (3.15) à l'aide de l'équation (3.14).

La série d'approximations successives que nous avons introduites dans le chapitre 2 se transpose immédiatement sur ces équations. Ainsi, le calcul à l'ordre 1 est obtenu en négligeant la dernière somme de l'équation (3.14). Nous pouvons ensuite effectuer les approximations $E_{p,kk'qq'}^{(2)} \approx E_{p,kk'00}^{(2)}$ et $E_{p,kk'qq'}^{(2)} \approx E_{p,kk'q0}^{(2)}$, ou résoudre les équations (3.13) à (3.15) de manière exacte. Enfin, indiquons que nous nous intéresserons surtout au cas d'une interaction attractive $g < 0$ ($a > 0$), puisque c'est la situation la plus proche de celle que nous avons décrite en dimension 3 et pour laquelle notre développement semble

le plus adapté.

3.1.4 Limites de couplage faible et d'attraction forte

Considérons maintenant la limite de couplage faible $g \rightarrow 0$ pour le potentiel chimique ($p = 0$). Naturellement, puisque notre fonction d'onde coïncide alors avec la fonction d'onde donnée par un calcul en théorie des perturbations, l'énergie fournie par notre approximation à l'ordre 1 est exacte jusqu'à l'ordre 2 en g . Ainsi, le terme linéaire en g est obtenu à partir de l'équation (3.13). Puisque d'après l'équation (3.14), $\alpha_{kq} \rightarrow 0$ dans cette limite, l'expression de $E_p^{(0)}$ donne simplement $\mu_\downarrow = gn_\uparrow$, c'est-à-dire l'énergie d'interaction de champ moyen. Nous obtenons ensuite la correction à l'ordre 2 en remplaçant α_{kq} par son expression à l'ordre dominant :

$$\alpha_{kq} \simeq -\frac{g}{E_{0,kq}^{(1)}} \simeq -\frac{g}{E_{q-k} + \epsilon_k - \epsilon_q}. \quad (3.16)$$

Le calcul de l'intégrale sur q et k dans l'équation (3.13) nous donne alors :

$$\mu_\downarrow = gn_\uparrow - m_\uparrow g^2 \left[\frac{1}{8} + \frac{\text{Li}_2(\alpha) - \text{Li}_2(-\alpha)}{2\pi^2} \right] + o(g^2), \quad (3.17)$$

où nous avons noté $\alpha = (m_\downarrow - m_\uparrow)/(m_\downarrow + m_\uparrow)$ et $\text{Li}_2(z) = \sum_{n \geq 1} z^n/n^2$ est la fonction dilogarithme.

Dans la limite d'attraction forte $g \rightarrow -\infty$, nous pouvons également vérifier que l'énergie de l'état lié $-\epsilon_b = -m_r g^2/2$ est solution de nos équations à l'ordre dominant. Dans cette limite, puisque $\mu_\downarrow \rightarrow -\infty$ et le vecteur d'onde q est limité à $|q| < k_F$, nous pouvons négliger q dans l'expression de $E_{0,kq}^{(1)}$. Nous pouvons alors sommer l'équation (3.14) sur q . Comme nous l'avons déjà vu, la dernière somme disparaît par antisymétrie de α_{kKqQ} sous l'échange de q et Q . Nous obtenons :

$$-g^{-1} \left[|\mu_\downarrow| + gn_\uparrow + k^2/(2m_r) \right] \sum'_q \alpha_{kq} = k_F/\pi + \sum'_{Kq} \alpha_{Kq} - n_\uparrow \sum'_Q \alpha_{kQ}. \quad (3.18)$$

Remarquons que la dernière somme de cette équation est exactement compensée par le terme gn_\uparrow du membre de gauche. Nous divisons ensuite par $[|\mu_\downarrow| + k^2/(2m_r)]$ et sommons sur k . À l'ordre dominant, nous trouvons $\sum'_k [|\mu_\downarrow| + k^2/(2m_r)]^{-1} = \sqrt{m_r/(2|\mu_\downarrow|)}$. Ainsi, en isolant la somme $\sum'_{kq} \alpha_{kq}$ dans le membre de gauche, nous trouvons :

$$\left[1 + g^{-1} \sqrt{2|\mu_\downarrow|/m_r} \right] \sum'_{kq} \alpha_{kq} = -k_F/\pi. \quad (3.19)$$

Enfin, en insérant cette relation dans l'équation (3.13), il vient $1 + g^{-1} \sqrt{2|\mu_\downarrow|/m_r} = gk_F/(\pi|\mu_\downarrow|)$ à l'ordre dominant, et cette équation est compatible avec $\mu_\downarrow = -m_r g^2/2$. Nous voyons sur cet exemple que les différents termes de l'équation (3.14) sont du même ordre de grandeur et se compensent de manière assez complexe. Ainsi, nous avons fait quelques vaines tentatives pour trouver la correction à l'ordre suivant dans cette limite

d'attraction forte.

3.2 Le cas des masses égales : un système intégrable

Nous considérons dans cette section la situation des masses égales $m_\downarrow = m_\uparrow = m$. Dans ce cas, le système est intégrable et la solution a été obtenue par McGuire [McG65, McG66] à l'aide de l'ansatz de Bethe. Cependant, plusieurs erreurs se sont glissées dans ces deux articles, nous reprenons donc ici les grandes étapes de la dérivation.

3.2.1 Fonction d'onde de l'ansatz de Bethe

Pour simplifier l'écriture des différentes équations, il se révèle être plus simple de supposer que le nombre total de particules est N ($N - 1$ fermions de spin \uparrow et 1 fermion de spin \downarrow), c'est ce que nous ferons donc dans cette section. De plus, sans perte de généralité, nous pouvons supposer que N est pair. Nous noterons x_1 la coordonnée du fermion \downarrow , l'Hamiltonien du système s'écrit donc en première quantification :

$$H = -\frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g \sum_{i=2}^N \delta(x_i - x_1). \quad (3.20)$$

Enfin, nous supposerons que le système est limité au segment $[-L/2, L/2]$ avec des conditions aux limites périodiques et feront tendre $L \rightarrow \infty$ dans la limite thermodynamique. Étant données N impulsions k_1, \dots, k_N (réelles ou complexes) supposées distinctes, la fonction d'onde de l'ansatz de Bethe fait intervenir deux types de permutations et s'écrit :

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} A_\tau(\sigma) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{\sigma(j)} x_j\right), \quad \text{si } x_{\tau(1)} < \dots < x_{\tau(N)}, \quad (3.21)$$

où \mathfrak{S}_N désigne l'ensemble des permutations de $\{1, \dots, N\}$, σ et $\tau \in \mathfrak{S}_N$. Remarquons que chacune des ondes planes qui composent ψ est vecteur propre de l'Hamiltonien (à l'intérieur de chaque région associée à une permutation τ) avec la même énergie, puisque le terme d'interaction est alors nul et :

$$H e^{i \sum_j k_{\sigma(j)} x_j} = \left(\sum_{j=1}^N \frac{k_{\sigma(j)}^2}{2m} \right) e^{i \sum_j k_{\sigma(j)} x_j} = \left(\sum_{j=1}^N \frac{k_j^2}{2m} \right) e^{i \sum_j k_{\sigma(j)} x_j}. \quad (3.22)$$

Cette propriété résulte de la symétrie de l'opérateur d'énergie cinétique pour $m_\downarrow = m_\uparrow$. Elle n'est malheureusement plus valable lorsque $m_\downarrow \neq m_\uparrow$, rendant alors impossible l'utilisation de cet ansatz.

Dans l'ansatz de Bethe (3.21), il y a $(N!)^2$ amplitudes $A_\tau(\sigma)$ à déterminer. Toutes ces amplitudes et les vecteurs d'onde k_i sont en fait contraints par l'antisymétrie et les conditions de raccordement entre chaque région. Tout d'abord, l'antisymétrie de la fonction d'onde sous l'échange de deux fermions \uparrow implique que celle-ci s'annule lorsque deux positions des fermions \uparrow sont égales. Nous pouvons par exemple supposer $x_1 < x_2 < x_4 < \dots < x_N$ et identifier dans la relation $\psi(x_1, x_2, x_2^+, x_4, \dots, x_N) = 0$ les amplitudes

de $e^{i(k_1x_1+(k_2+k_3)x_2+k_4x_4+\dots+k_Nx_N)}$. Le point considéré appartient à la région $\tau = \text{id}$ et nous trouvons :

$$A_{\text{id}}(123 \cdots N) + A_{\text{id}}(1324 \cdots N) = 0, \quad (3.23)$$

où nous avons utilisé la notation $\sigma = (\sigma(1)\sigma(2) \cdots \sigma(N))$. En généralisant sans difficulté à d'autres frontières et à d'autres régions (correspondant à une permutation τ) nous obtenons les relations :

$$A_\tau(123 \cdots N) = -A_\tau(1324 \cdots N) = A_\tau(1342 \cdots N) = \dots \quad (3.24)$$

Ainsi, pour une région donnée, il n'y a plus que N amplitudes indépendantes correspondant aux différentes valeurs possibles de $\sigma(1)$: $A_\tau(1234 \cdots N)$, $A_\tau(2134 \cdots N)$, $A_\tau(3214 \cdots N)$, ... Les autres sont obtenues à partir de ces N amplitudes en multipliant par la signature de la permutation σ restreinte à l'ensemble $\{2, \dots, N\}$.

L'antisymétrie de la fonction d'onde ψ nous permet également de relier les amplitudes entre deux régions différentes. En supposant par exemple $x_1 < x_2 < \dots < x_N$ et en utilisant la relation $\psi(x_1, x_2, x_3, x_4, \dots, x_N) = -\psi(x_1, x_3, x_2, x_4, \dots, x_N)$, nous trouvons que les amplitudes dans la région $\tau = (1324 \cdots N)$ sont les opposées de celles de la région id . Nous pouvons à nouveau généraliser cette procédure à toute région obtenue par permutation des fermions \uparrow et nous déduisons alors que, pour une permutation σ donnée, il n'y a que N amplitudes indépendantes correspondant aux différentes valeurs de $\tau^{-1}(1) = q$. Ainsi, nous noterons $A_q(\sigma)$ l'amplitude correspondant à $\tau_q = (234 \cdots q1(q+1) \cdots N)$, toutes les autres pouvant s'en déduire en multipliant par -1 pour chaque échange de fermions \uparrow nécessaire pour se ramener dans la région q .

Voyons maintenant comment nous pouvons relier les amplitudes $A_q(\sigma)$ à $A_1(\sigma)$. Pour cela, nous supposons par exemple que $x_1 < x_3 < \dots < x_N$, et utilisons la condition aux limites périodique pour x_2 : $\psi(x_1, -L/2^+, x_3, \dots, x_N) = \psi(x_1, L/2^-, x_3, \dots, x_N)$. À gauche de cette égalité, le point appartient à la région 2 puisque $x_2 < x_1 < x_3 < \dots < x_N$, alors qu'à droite il appartient à la région correspondant à $x_1 < x_3 < \dots < x_N < x_2$. On passe de cette région à la région 1 en échangeant successivement x_2 avec x_N, \dots, x_3 . Les amplitudes dans cette région sont donc $(-1)^{N-2}A_1(\sigma) = A_1(\sigma)$ car N est pair. Ainsi, en identifiant les amplitudes de $e^{i(k_{\sigma(1)}x_1+k_{\sigma(3)}x_3+\dots+k_{\sigma(N)}x_N)}$ dans cette égalité, nous trouvons :

$$A_2(\sigma) = A_1(\sigma)e^{ik_{\sigma(2)}L}. \quad (3.25)$$

Nous pouvons relier de même $A_3(\sigma)$ à $A_2(\sigma)$, $A_4(\sigma)$ à $A_3(\sigma)$, etc... et nous obtenons pour la région q :

$$A_q(\sigma) = A_1(\sigma)e^{i(k_{\sigma(2)}L+k_{\sigma(3)}L+\dots+k_{\sigma(q)}L)}. \quad (3.26)$$

Enfin, la condition aux limites périodique pour x_1 nous donne une relation sur les k_i . En effet, si nous supposons $x_2 < x_3 < \dots < x_N$ et écrivons $\psi(-L/2^+, x_2, x_3, \dots, x_N) = \psi(L/2^-, x_2, x_3, \dots, x_N)$, nous obtenons la relation $A_1(\sigma) = A_N(\sigma)e^{ik_{\sigma(1)}L}$. Or, l'équation (3.26) pour $q = N$ permet également de relier $A_N(\sigma)$ à $A_1(\sigma)$. Nous déduisons donc que :

$$\sum_{i=1}^N k_i L = 2n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (3.27)$$

Il ne nous reste donc plus qu'à déterminer les N amplitudes de la région 1 et les vecteurs d'onde k_i . Ce sont les conditions de raccordement en $x_1 = x_2$ qui vont nous le permettre. Ainsi, en écrivant la continuité de la fonction d'onde $\psi(x_1, x_1^+, x_3, \dots, x_N) = \psi(x_1, x_1^-, x_3, \dots, x_N)$ et en identifiant l'amplitude de $e^{i((k_1+k_2)x_1+k_3x_3+\dots+k_Nx_N)}$ des deux côtés de cette frontière, nous obtenons :

$$A_1(123 \cdots N) + A_1(213 \cdots N) = A_2(123 \cdots N) + A_2(213 \cdots N). \quad (3.28)$$

Le potentiel de contact dans l'Hamiltonien (3.20) impose une discontinuité de la dérivée. Nous pouvons l'obtenir en isolant le mouvement relatif des particules 1 et 2. Si nous posons, $Z = (x_1 + x_2)/2$ et $z = x_1 - x_2$, l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{1}{4m} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} - \frac{1}{m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + g\delta(z) - \frac{1}{2m} \sum_{i=3}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g \sum_{i=3}^N \delta(x_i - Z - z/2). \quad (3.29)$$

En intégrant alors l'équation de Schrödinger entre $z = 0^-$ et $z = 0^+$, nous obtenons alors :

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} \Big|_{z=0^+} - \frac{\partial}{\partial z} \Big|_{z=0^-} \right] \psi = mg\psi(z=0). \quad (3.30)$$

Enfin, à l'aide de la relation $\partial/\partial z = 1/2(\partial/\partial x_1 - \partial/\partial x_2)$, cette équation devient :

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2} \right)_{x_2=x_1^-} - \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2} \right)_{x_2=x_1^+} \right] \psi = 2mg\psi(x_2 = x_1). \quad (3.31)$$

En identifiant à nouveau l'amplitude de $e^{i((k_1+k_2)x_1+k_3x_3+\dots+k_Nx_N)}$, nous trouvons :

$$\begin{aligned} i(k_1 - k_2)[A_2(123 \cdots N) - A_2(213 \cdots N) - A_1(123 \cdots N) + A_1(213 \cdots N)] \\ = 2mg [A_1(123 \cdots N) + A_1(213 \cdots N)]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Nous pouvons alors écrire les équations (3.28) et (3.32) sous la forme d'un système matriciel :

$$\begin{pmatrix} A_2(123 \cdots N) \\ A_2(213 \cdots N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 1/s_{12} & 1/s_{12} \\ -1/s_{12} & 1 - 1/s_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1(123 \cdots N) \\ A_1(213 \cdots N) \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

où nous avons noté $s_{12} = i(k_1 - k_2)/(mg)$. Or, nous avons vu que nous pouvons exprimer A_2 en fonction de A_1 à l'aide de l'équation (3.25). Ce système peut donc s'écrire sous la forme d'un système homogène pour $A_1(123 \cdots N)$ et $A_1(213 \cdots N)$. Il admet une solution non nulle si son déterminant est nul :

$$\begin{vmatrix} 1 + 1/s_{12} - e^{ik_2L} & 1/s_{12} \\ -1/s_{12} & 1 - 1/s_{12} - e^{ik_1L} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.34)$$

Cette équation contraint les vecteurs d'onde k_1 et k_2 à vérifier la relation :

$$\alpha z_1 - \cot z_1 = \alpha z_2 - \cot z_2, \quad (3.35)$$

où nous avons noté $z_i = k_i L/2$ et $\alpha = 4/(mgL)$. De plus, le rapport entre les amplitudes s'écrit alors $A_1(123 \cdots N)/A_1(213 \cdots N) = -(1 - e^{ik_1 L})/(1 - e^{ik_2 L})$.

Nous pouvons généraliser sans difficulté cette étude aux autres permutations σ . Nous en déduisons alors les règles suivantes nous permettant de calculer les vecteurs d'onde k_i et les amplitudes $A_q(\sigma)$:

1. Les coefficients $z_i = k_i L/2$ sont racines de l'équation :

$$\alpha z - \cot z = c, \quad \text{avec la contrainte} \quad \sum_{i=1}^N z_i = n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (3.36)$$

où c est une constante et $\alpha = 4/(mgL)$. L'impulsion totale k et l'énergie E sont alors données par :

$$k = \sum_{i=1}^N k_i = \frac{2}{L} \sum_{i=1}^N z_i = \frac{2n\pi}{L} \quad \text{et} \quad E = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N k_i^2 = \frac{2}{mL^2} \sum_{i=1}^N z_i^2. \quad (3.37)$$

2. Dans la région q , correspondant à $x_2 < x_3 < \cdots < x_q < x_1 < x_{q+1} < \cdots < x_N$, les amplitudes de l'ansatz de Bethe (3.21) sont données par :

$$\begin{aligned} A_q(\sigma) &= \varepsilon(\sigma)(1 - e^{ik_{\sigma(1)}L})e^{i(k_{\sigma(2)}L + k_{\sigma(3)}L + \cdots + k_{\sigma(q)}L)} \\ &= -\varepsilon(\sigma)2ie^{iz_{\sigma(1)}} \sin z_{\sigma(1)} e^{2i(z_{\sigma(2)} + z_{\sigma(3)} + \cdots + z_{\sigma(q)})}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Indiquons enfin que cette étude a été généralisée ensuite au cas de 2 atomes \downarrow par Flicker et Lieb [FL67], puis pour une polarisation arbitraire par Gaudin [Gau67] et Yang [Yan67]. Ainsi, lorsque les masses sont égales en dimension 1, il est possible de calculer de manière exacte l'énergie du système en fonction de la polarisation et de l'interaction. En utilisant l'approximation de densité locale, Orso [Ors07] et Hu *et al.* [HLD07] ont ainsi pu déterminer le diagramme de phases d'un gaz de Fermi polarisé à une dimension. En particulier, ils ont prédit que la phase centrale d'un gaz partiellement polarisé présente une superfluidité de type Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) [FF64, LO64]. Des expériences sont notamment en cours dans le groupe de Hulet à l'Université Rice [LRP⁺09].

3.2.2 Calcul du potentiel chimique et de la masse effective

Nous allons maintenant calculer le potentiel chimique et la masse effective de l'atome \downarrow dans la limite thermodynamique. Nous devons donc résoudre les équations (3.36) et (3.37) en supposant L grand.

Lorsque l'interaction est répulsive $\alpha = 4/(mgL) > 0$, nous pouvons voir sur la figure 3.1-(a) que l'énergie minimale est réalisée en prenant $c = 0$. En effet, nous devons trouver N racines (N est supposé pair) et l'énergie est donnée par la relation (3.37). La situation la plus favorable est obtenue en choisissant des racines symétriques par rapport à l'origine (i.e. si z est solution, $-z$ est solution), correspondant à $c = 0$. Nous vérifierons ce point ultérieurement en calculant effectivement l'énergie lorsque $c \neq 0$. À l'ordre $1/L$,

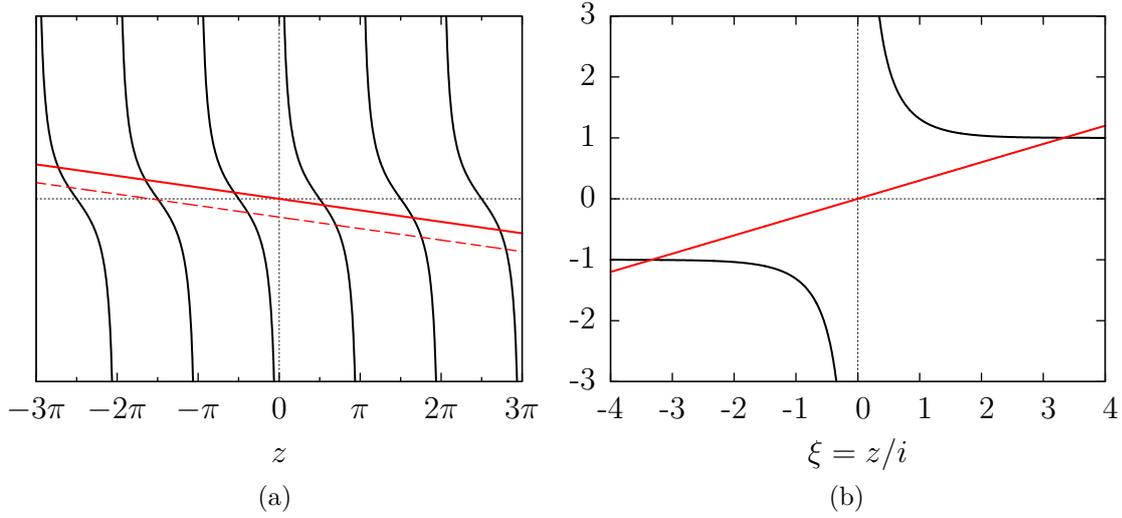


FIG. 3.1: Résolution graphique de l'équation $\alpha z = \cot z$ et $\alpha z - c = \cot z$ pour z réel (a) et z imaginaire pur (b), dans la limite $\alpha = 4/(mgL) \rightarrow 0$ ($L \rightarrow \infty$). Les figures correspondent à $\alpha < 0$. Pour $\alpha > 0$, il n'y a pas de solution complexe.

les solutions s'écrivent alors :

$$z_p^+ = p\pi + \operatorname{arccot}(p\alpha\pi) \quad \text{et} \quad z_p^- = -p\pi - \operatorname{arccot}(p\alpha\pi), \quad (3.39)$$

où p est un entier $p = 0, \dots, N/2 - 1$. Nous déduisons alors que le vecteur d'onde de Fermi est à l'ordre dominant $k_F = 2z_{N/2-1}^+/L = N\pi/L$. À l'ordre $1/N$, l'énergie totale est donc :

$$\frac{E}{E_F} = 2 \sum_{p=0}^{N/2-1} \left(\frac{z_p^+}{N\pi/2} \right)^2 \simeq 2 \sum_{p=0}^{N/2-1} \left(\frac{p}{N/2} \right)^2 + \frac{16}{\pi N^2} \sum_{p=0}^{N/2-1} p \operatorname{arccot}(2p/(yN)), \quad (3.40)$$

où nous avons utilisé $E_F = (N\pi/L)^2/2m$, $\alpha\pi = 4k_F/(mgN) = 2/(yN)$ et noté $y = mg/(2k_F) = -1/k_F a$. Le premier terme est l'énergie de $N - 1$ particules \uparrow sans interaction. Le potentiel chimique qui correspond à la variation de l'énergie due à la présence du fermion \downarrow s'identifie donc avec le deuxième terme. Dans la limite $N \rightarrow +\infty$, la somme devient une intégrale que nous pouvons calculer analytiquement :

$$\frac{\mu_{\downarrow}}{E_F} = \frac{4}{\pi} \int_0^1 u \operatorname{arccot}(u/y) du = \frac{2}{\pi} \left[y + \arctan y - y^2 \arctan(1/y) \right]. \quad (3.41)$$

Lorsque l'interaction est attractive $\alpha < 0$, l'équation $\alpha z = \cot z$ admet 2 solutions imaginaires pures conjuguées. En effet, en posant $z = i\xi$, nous obtenons $-\alpha\xi = \coth \xi$. D'après la figure 3.1-(b), les solutions de cette équation sont $\xi = \pm 1/\alpha$ à l'ordre $1/L$. Ainsi, l'énergie minimale est obtenue en prenant $z_1 = i/\alpha$, $z_2 = -i/\alpha$ et les $N - 2$ racines réelles z_p^+ et z_p^- pour $p = 1, \dots, N/2 - 1$. L'énergie associée aux deux racines complexes est $2(z_1^2 + z_2^2)/(mL^2) = -mg^2/4 = -\epsilon_b = -2y^2 E_F$. Nous en déduisons donc, comme

précédemment, que :

$$\frac{\mu_{\downarrow}}{E_F} = -2y^2 + \frac{4}{\pi} \int_0^1 u \operatorname{arccot}(u/y) du = -2y^2 + \frac{2}{\pi} \left[y + \arctan y - y^2 \arctan(1/y) \right]. \quad (3.42)$$

Enfin, en utilisant les propriétés de la fonction \arctan , nous pouvons écrire les équations (3.41) et (3.42) sous une forme valable quel que soit le signe de y . Nous obtenons :

$$\frac{\mu_{\downarrow}}{E_F} = \frac{2}{\pi} \left[y - \frac{\pi}{2} y^2 + (1 + y^2) \arctan y \right], \quad (3.43)$$

qui est une fonction totalement régulière de $y = mg/2k_F = -1/k_F a$. Nous en déduisons notamment les développements de μ_{\downarrow} dans la limite de couplage faible $g \rightarrow 0$:

$$\mu_{\downarrow} = gn_{\uparrow} - \frac{mg^2}{8} + \frac{m^2 g^3}{12\pi k_F} + o(g^3). \quad (3.44)$$

et dans la limite d'attraction forte $g \rightarrow -\infty$:

$$\mu_{\downarrow} = -\epsilon_b - E_F + \frac{2ak_F^3}{3\pi m} + o(k_F a). \quad (3.45)$$

Dans la limite $g \rightarrow 0$, nous remarquons que le terme d'ordre 2 en g est en accord avec celui de l'équation (3.17) que nous avons obtenu en ne prenant en compte qu'une seule paire particule-trou.

La masse effective de l'atome \downarrow est obtenue de la même manière que le potentiel chimique. Elle est donnée par le comportement à petite impulsion totale k du spectre des excitations sans gap. Pour cela, nous résolvons l'équation (3.36) pour une constante c non nulle, puis éliminons c au profit de k à l'aide de la relation (3.37). Lorsque $\alpha > 0$, les solutions sont à l'ordre $1/L$:

$$z_p^+ = p\pi + \operatorname{arccot}(p\alpha\pi - c) \quad \text{et} \quad z_p^- = -p\pi - \operatorname{arccot}(p\alpha\pi + c), \quad (3.46)$$

où p est un entier $p = 0, \dots, N/2 - 1$, et lorsque $\alpha < 0$, nous avons deux racines complexes conjuguées $z_1 = c/\alpha + i/\alpha$, $z_2 = c/\alpha - i/\alpha$ et $N - 2$ racines réelles z_p^+ et z_p^- pour $p = 1, \dots, N/2 - 1$. L'impulsion associée à une racine complexe est $2c/(L\alpha) = cyk_F$. Nous déduisons alors que l'impulsion totale est :

$$\begin{aligned} \frac{k}{k_F} &\simeq 2cy\theta(-y) + \frac{2}{\pi N} \sum_{p=0 \text{ ou } 1}^{N/2-1} [\operatorname{arccot}(2p/(yN) - c) - \operatorname{arccot}(2p/(yN) + c)] \\ &= 2cy\theta(-y) + \frac{1}{\pi} \int_0^1 [\operatorname{arccot}(u/y - c) - \operatorname{arccot}(u/y + c)] du, \end{aligned} \quad (3.47)$$

où θ est la fonction de Heaviside. Dans la limite $c \rightarrow 0$, cette intégrale peut être évaluée simplement. Nous obtenons :

$$\frac{k}{k_F} = 2cy\theta(-y) + \frac{2}{\pi} cy \arctan(1/y) = cy \left[1 - \frac{2}{\pi} \arctan y \right]. \quad (3.48)$$

Nous pouvons alors calculer comme précédemment l'énergie totale à l'ordre $1/N$ en utilisant la relation (3.37). L'énergie associée aux deux racines complexes est $2(z_1^2 + z_2^2)/(mL^2) = -2y^2(1 - c^2)E_F$. En isolant l'énergie correspondant aux $N - 1$ particules \uparrow sans interaction, nous trouvons l'énergie de la quasi-particule associée à la constante c :

$$\frac{E[c]}{E_F} \simeq -2y^2(1 - c^2)\theta(-y) + \frac{8}{\pi N^2} \sum_{p=0 \text{ ou } 1}^{N/2-1} p [\operatorname{arccot}(2p/(yN) - c) + \operatorname{arccot}(2p/(yN) + c)]. \quad (3.49)$$

À nouveau, dans la limite $N \rightarrow +\infty$, la somme devient une intégrale :

$$\frac{E[c]}{E_F} = -2y^2(1 - c^2)\theta(-y) + \frac{2}{\pi} \int_0^1 u [\operatorname{arccot}(u/y - c) + \operatorname{arccot}(u/y + c)] du. \quad (3.50)$$

Pour $c = 0$, nous retrouvons naturellement l'expression du potentiel chimique (cf. équations (3.41) et (3.42)). Dans la limite $k \rightarrow 0$, correspondant à $c \rightarrow 0$ d'après l'équation (3.48), le terme linéaire en c est nul et le développement à l'ordre 2 est :

$$E[c] = \mu_{\downarrow} + c^2 E_F \left\{ 2y^2\theta(-y) + \frac{2}{\pi} \int_0^1 u \operatorname{arccot}''(u/y) du \right\} + o(c^2). \quad (3.51)$$

Le calcul de cette intégrale est immédiat en intégrant par parties. Nous trouvons :

$$E[c] = \mu_{\downarrow} + c^2 y^2 E_F \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \left[\arctan y + \frac{y}{1 + y^2} \right] \right\} + o(c^2). \quad (3.52)$$

Enfin, en éliminant c au profit de k à l'aide de la relation (3.48), nous obtenons une relation de dispersion de la forme $E[k] = \mu_{\downarrow} + k^2/2m^* + o(k^2)$, où la masse effective est donnée par :

$$\frac{m^*}{m} = \frac{\left(1 - \frac{2}{\pi} \arctan y\right)^2}{1 - \frac{2}{\pi} \left[\arctan y + \frac{y}{1+y^2}\right]}. \quad (3.53)$$

Rappelons que ce résultat a été obtenu par McGuire [McG66], mais il y a plusieurs erreurs de signe dans son expression de m^* et les équations précédentes. Dans la limite de couplage faible $g \rightarrow 0$, cette expression montre que m^* tend comme attendu vers la masse de la particule libre m . Dans la limite d'attraction forte $g \rightarrow -\infty$, nous trouvons que $m^* \rightarrow 2m$ qui est la masse du dimère, alors que dans la limite de répulsion forte $g \rightarrow +\infty$ nous avons $m^* \rightarrow \infty$.

3.2.3 Fonction de corrélation de paire

Indiquons enfin que puisque nous avons déterminé la fonction d'onde de l'état fondamental à l'aide de l'ansatz de Bethe (3.21), il est possible de calculer notamment la fonction de corrélation de paire obtenue par intégration du carré de la fonction d'onde sur les positions de $N - 2$ particules \uparrow . L'invariance par translation du système implique que cette fonction de corrélation ne dépend que de la différence $x = x_1 - x_2$ et son interprétation est analogue à la densité locale de l'espèce majoritaire que nous avons

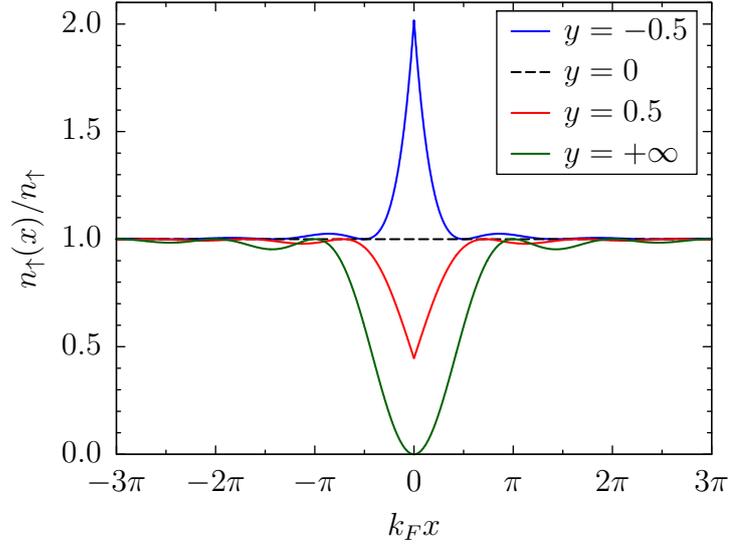


FIG. 3.2: Densité locale des atomes \uparrow en fonction de $k_F x$, lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow = m$, pour différentes valeurs de l'interaction $y = mg/2k_F = -1/k_F a$.

calculée en dimension 3 lorsque $m_\downarrow = \infty$ (cf. équation (2.37)) et que nous calculerons dans la prochaine section en dimension 1. Ce calcul a également été réalisé par McGuire dans [McG66] (avec quelques erreurs à nouveau). Nous ne donnerons ici que l'expression exacte, valable quel que soit le signe de $y = mg/2k_F$:

$$\frac{n_\uparrow(x)}{n_\uparrow} = 1 - \frac{2\pi y |Q(x)|^2}{1 - \frac{2}{\pi} \arctan y}, \quad (3.54)$$

où la fonction $Q(x)$ est donnée par :

$$\begin{aligned} Q(x) &= e^{k_F |x| y} \theta(-y) - \frac{i}{2\pi} \int_{-1}^1 \frac{e^{-iuk_F |x|}}{u - iy} du \\ &= e^{k_F |x| y} \theta(-y) - \frac{1}{\pi} \int_0^1 \frac{\sin(uk_F |x| - \operatorname{arccot}(u/y))}{\sqrt{u^2 + y^2}} du. \end{aligned} \quad (3.55)$$

En particulier, dans la limite de répulsion forte $y \rightarrow +\infty$, nous avons $n_\uparrow(x) = n_\uparrow [1 - \sin^2(k_F x)/(k_F x)^2]$ qui s'annule lorsque $x = 0$. Nous retrouvons donc à nouveau les oscillations de Friedel. Dans le cas général, nous avons $Q(0) = [1 - (2/\pi) \arctan y]/2$ et :

$$\frac{n_\uparrow(0)}{n_\uparrow} = 1 - \frac{\pi}{2} y + y \arctan y. \quad (3.56)$$

Nous représentons sur la figure 3.2 $n_\uparrow(x)/n_\uparrow$ pour différentes valeurs de l'interaction. Nous remarquons sur l'expression (3.54) que lorsque $y > 0$, nous avons $n_\uparrow(x) \leq n_\uparrow$ alors que pour $y < 0$, nous avons $n_\uparrow(x) \geq n_\uparrow$. Cette caractéristique peut paraître à première vue surprenante, puisqu'elle semble en désaccord avec la conservation du nombre de particules. Cependant, si on considère un système de taille finie $[-L/2, L/2]$, nous

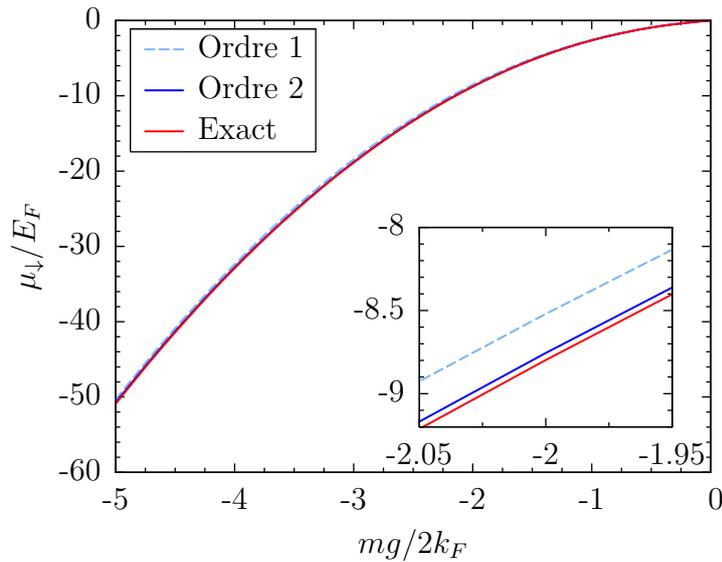


FIG. 3.3: Potentiel chimique de l'atome \downarrow lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow = m$ en fonction de $y = mg/2k_F = -1/k_F a$ pour une interaction attractive : à l'ordre 1 en tirets clairs, à l'ordre 2 en trait plein et solution exacte (cf. équation (3.43)) en rouge.

observons effectivement des oscillations autour de n_\uparrow , assurant $\int n_\uparrow(x)dx = N$. Mais lorsque la taille du système augmente, ces oscillations se produisent au voisinage de $\pm L/2$ et ne sont donc pas présentes à une distance x finie lorsque nous prenons la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$.

3.2.4 Comparaison au développement paires particule-trou

Puisque nous avons obtenu la solution exacte de ce problème, nous pouvons naturellement la comparer aux résultats donnés par notre série d'approximations successives. Ainsi, nous représentons sur les figures 3.3 et 3.4 le potentiel chimique et la masse effective de l'atome \downarrow lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow = m$ pour une interaction attractive $g < 0$. Pour le potentiel chimique, nous voyons que les résultats à l'ordre 1 sont déjà très bons, l'ordre 2 étant presque impossible à distinguer de la solution exacte, même sur le zoom de la figure 3.3. Plus précisément, nous avons considéré la situation où $mg/k_F = -1$ et appliqué notre série d'approximations successives. Nos résultats sont représentés sur la figure 3.5 qui est analogue à la figure 2.8. La solution exacte est alors $\mu_\downarrow = -0.9373 E_F$. Nous pouvons considérer à l'ordre 0 le terme de champ moyen qui vaut $\mu_\downarrow = gn_\uparrow = -0.6366 E_F$, c'est-à-dire une erreur relative de $3.2 \cdot 10^{-1}$ par rapport à la solution exacte. Le résultat à l'ordre 1 est $\mu_\downarrow = -0.9242 E_F$, correspondant à une erreur relative de $1.4 \cdot 10^{-2}$, alors que le résultat à l'ordre 2 est $\mu_\downarrow = -0.9361 E_F$, c'est-à-dire une erreur relative de seulement $1.3 \cdot 10^{-3}$. Notons que nous pouvons également appliquer les approximations intermédiaires $E_{p,kk'qq'}^{(2)} \approx E_{p,kk'00}^{(2)}$ et $E_{p,kk'qq'}^{(2)} \approx E_{p,kk'q0}^{(2)}$. Nous voyons donc sur cet exemple que la convergence est très rapide, confirmant l'idée que le résultat obtenu en dimension 3 dans le chapitre 2 est vraiment très proche de la solution exacte. Cela est d'autant plus le cas que nous nous attendons à une convergence moins rapide en dimension 1 qu'en

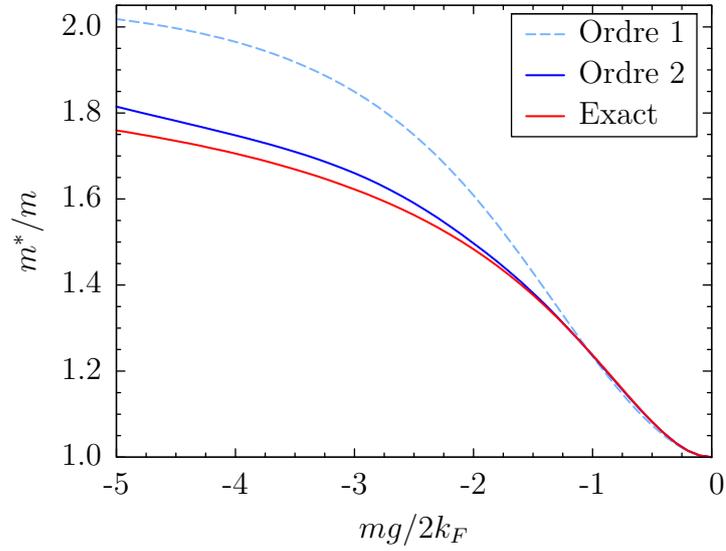


FIG. 3.4: Masse effective de l'atome \downarrow lorsque $m_{\downarrow} = m_{\uparrow} = m$ en fonction de $y = mg/2k_F = -1/k_F a$ pour une interaction attractive : à l'ordre 1 en tirets clairs, à l'ordre 2 en trait plein et solution exacte (cf. équation (3.53)) en rouge.

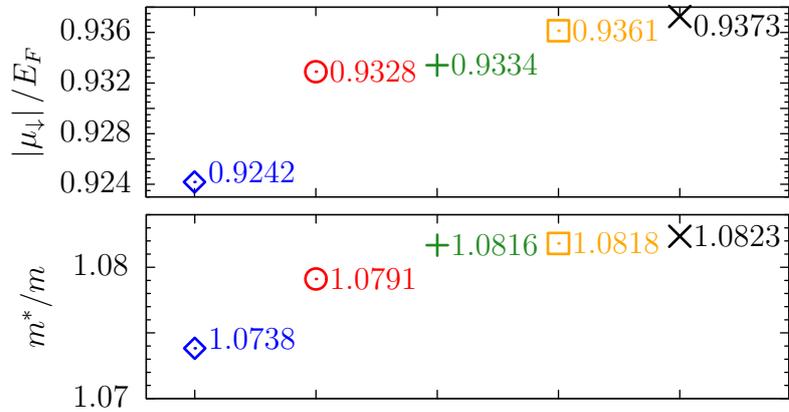


FIG. 3.5: Potentiel chimique et masse effective de l'atome \downarrow lorsque $m_{\downarrow} = m_{\uparrow} = m$ et $mg/k_F = -1$, correspondant à notre série d'approximations successives. Losange : ordre 1. Rond : ordre 2 avec $E_{p,kk'qq'}^{(2)} \approx E_{p,kk'00}^{(2)}$. Plus : ordre 2 avec $E_{p,kk'qq'}^{(2)} \approx E_{p,kk'q0}^{(2)}$. Carré : ordre 2 sans approximation (variationnel). Croix : solution exacte.

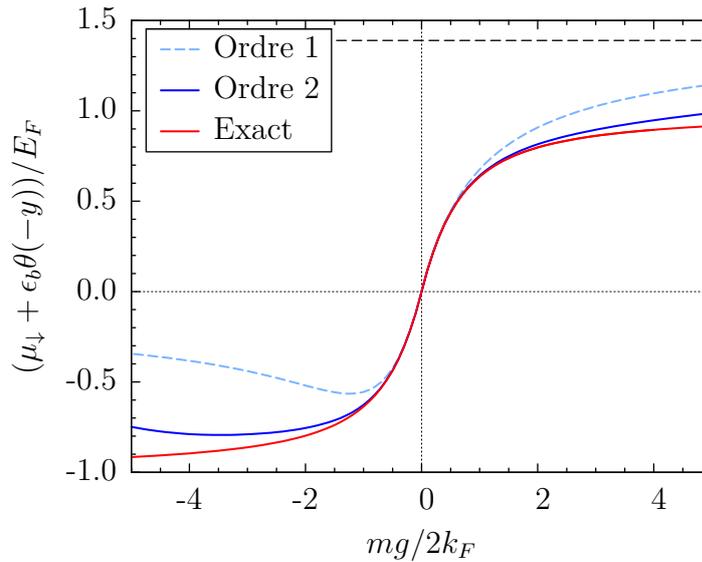


FIG. 3.6: Potentiel chimique de l'atome \downarrow lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow = m$ en fonction de $y = mg/2k_F = -1/k_F a$. Lorsque l'interaction est attractive, nous avons retiré le terme dominant $-\epsilon_b$. À l'ordre 1 en tirets clairs, à l'ordre 2 en trait plein et solution exacte en rouge. Dans la limite de répulsion forte $g \rightarrow +\infty$, l'ordre 1 et l'ordre 2 donnent $\mu_\downarrow = 1.389 E_F$ (indiqué par la ligne en tirets noirs) alors que le résultat exact est $\mu_\downarrow = E_F$.

dimension 3. En effet, nous avons vu que l'efficacité de ce développement est étroitement liée au développement à petit q . Elle fait donc intervenir le rapport entre la taille de l'espace des phases des particules $k > k_F$ et celui des trous $q < k_F$, et ce rapport est clairement une fonction croissante de la dimension.

Nous voyons sur la figure 3.4 que nos résultats à l'ordre 2 pour la masse effective sont également très bons. L'amélioration par rapport à l'ordre 1 est plus importante que pour le potentiel chimique, comme nous avons déjà pu le remarquer en dimension 3. La convergence de notre série d'approximations pour la masse effective apparaît à nouveau très clairement sur la deuxième partie de la figure 3.5. Enfin, remarquons que bien que notre calcul donne naturellement une borne supérieure de l'énergie puisqu'il s'agit d'un résultat variationnel, la valeur de la masse effective que nous obtenons n'est pas une borne inférieure de la solution exacte. En effet, celle-ci fait intervenir une différence d'énergies et nous perdons donc l'aspect variationnel.

Dans la limite d'attraction forte, nos différents résultats pour le potentiel chimique semblent naturellement très proches sur la figure 3.3 puisque le terme dominant $-\epsilon_b$ tend vers $-\infty$. Pour rendre la différence entre nos approximations plus importante et plus visible, nous pouvons retrancher ce terme dominant. Notons que nous avons également considéré la situation où l'interaction est répulsive. Ainsi, nous représentons sur la figure 3.6 la valeur de $\mu_\downarrow + \epsilon_b \theta(-y)$ en fonction de $y = mg/2k_F$. Nous voyons que lorsque l'interaction est répulsive, dans la zone de couplage faible, nos résultats sont encore relativement bons. Cependant, lorsque l'interaction augmente, l'accord devient de plus en plus mauvais. En particulier, nous verrons à la fin de ce chapitre que dans la

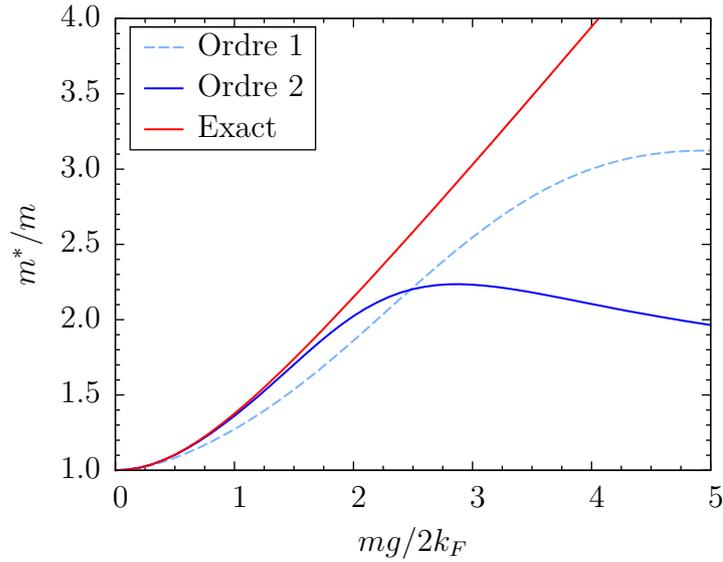


FIG. 3.7: Masse effective de l'atome \downarrow lorsque $m_{\downarrow} = m_{\uparrow} = m$ en fonction de $y = mg/2k_F = -1/k_F a$ pour une interaction répulsive : à l'ordre 1 en tirets clairs, à l'ordre 2 en trait plein et solution exacte en rouge.

limite de répulsion forte, nous obtenons à l'ordre 1 et à l'ordre 2 $\mu_{\downarrow} = 1.389 E_F$ alors que le résultat exact est $\mu_{\downarrow} = E_F$. Ce désaccord peut être compris à l'aide de notre étude du chapitre précédent. En effet, l'énergie E est désormais positive dans les expressions de $E_{p,kq}^{(1)}$ et $E_{p,kk'qq'}^{(2)}$. Par conséquent, nous pouvons voir que cela rend la dépendance en q de ces deux termes plus importante. Or, nous avons montré que l'efficacité de notre approximation était justement liée à une faible dépendance en les vecteurs d'onde des trous. Enfin, cette remarque nous permet également de comprendre les mauvais résultats donnés par nos approximations pour le calcul de la masse effective lorsque l'interaction est répulsive. En effet, nous voyons sur la figure 3.7, qu'au-delà de $mg/2k_F \sim 1.5$, même l'ordre 2 devient insatisfaisant.

3.3 L'impureté de masse infinie

3.3.1 Expression du potentiel chimique

Nous nous intéressons dans cette section à la limite $m_{\downarrow} \rightarrow \infty$. Comme dans le cas de la dimension 3, ce système est alors exactement soluble puisqu'il se ramène à un problème à un corps. La méthode est analogue à celle que nous avons utilisée dans le chapitre 2 ; nous ne donnerons donc que les grandes étapes. Ainsi, nous plaçons l'impureté au centre du segment $[-R, R]$ avec $R \rightarrow \infty$ dans la limite thermodynamique. Sans perte de généralité, nous pouvons supposer que le nombre d'atomes \uparrow est pair. Comme nous l'avons vu dans la première section de ce chapitre, les fonctions d'onde des états de diffusion sont données par les équations (3.4) et (3.5) et seuls les états pairs (correspondant aux états en onde s en dimension 3) sont modifiés par la présence de l'impureté. Les valeurs de k sont

quantifiées par la condition aux limites $\varphi_k(x = R) = 0$. Nous trouvons :

$$k_p^+ R + \delta(k_p^+) = (p - 1/2)\pi \quad \text{et} \quad k_p^- R = p\pi, \quad (3.57)$$

où p est un entier $p \geq 1$ et $\cot \delta(k_p^+) = k_p^+ a$. Les constantes A_k^+ et A_k^- sont déterminées à l'aide de la contrainte de normalisation des fonctions d'onde. À l'ordre dominant, nous obtenons $(A_k^+)^2 = (A_k^-)^2 \simeq 1/R$.

Lorsque la constante de couplage g est positive, les N atomes \uparrow forment une mer de Fermi en occupant les N états de diffusion de plus basse énergie ($N/2$ états pairs et $N/2$ états impairs) correspondant à $p = 1, \dots, N/2$. Le vecteur d'onde de Fermi est donc $k_F = (N/2)\pi/R$ et l'énergie totale est $\sum_{p=1}^{N/2} (k_p^+)^2/2m_\uparrow + \sum_{p=1}^{N/2} (k_p^-)^2/2m_\uparrow$.

Lorsque l'interaction est attractive ($g < 0$), nous avons vu que le potentiel de contact possède un état lié d'énergie $-\epsilon_b = -1/2m_\uparrow a^2 = -m_\uparrow g^2/2$ et sa fonction d'onde est donnée par l'équation (3.9). En partant de la situation sans interaction, pour laquelle $\delta(k_p^+) = 0$ et $k_p^+ = (p-1/2)\pi/R$ avec $p = 1, \dots, N/2$, nous trouvons que les N atomes \uparrow occupent $N/2 - 1$ états de diffusion pairs correspondant à $p = 2, \dots, N/2$, l'état lié et $N/2$ états de diffusion impairs. L'énergie totale est donc $-1/2m_\uparrow a^2 + \sum_{p=2}^{N/2} (k_p^+)^2/2m_\uparrow + \sum_{p=1}^{N/2} (k_p^-)^2/2m_\uparrow$.

Le potentiel chimique est alors obtenu en retranchant la valeur de l'énergie de la mer de Fermi sans interaction :

$$E_{\text{FS}} = \sum_{p=1}^{N/2} \frac{((p-1/2)\pi/R)^2}{2m_\uparrow} + \sum_{p=1}^{N/2} \frac{(p\pi/R)^2}{2m_\uparrow}. \quad (3.58)$$

En négligeant les termes d'ordre $1/N$ qui tendent vers 0 dans la limite thermodynamique et en utilisant $E_F = (N\pi/2R)^2/2m_\uparrow$, nous trouvons :

$$\frac{\mu_\downarrow}{E_F} = -y^2\theta(-y) - \frac{8}{\pi N^2} \sum_{p=1}^{N/2} p \delta(k_p^+), \quad (3.59)$$

où nous avons noté $y = m_\uparrow g/k_F = -1/k_F a$ et θ est la fonction de Heaviside. À l'ordre $1/N$ le déphasage s'écrit $\delta(k_p^+) = -\text{arccot}(2p/(yN))$, et dans la limite $N \rightarrow +\infty$ la somme devient une intégrale :

$$\frac{\mu_\downarrow}{E_F} = -y^2\theta(-y) + \frac{2}{\pi} \int_0^1 u \text{arccot}(u/y) du, \quad (3.60)$$

que nous pouvons calculer simplement. Enfin, en utilisant les propriétés de la fonction arctan, nous pouvons mettre le résultat sous une forme valable quel que soit le signe de y , comme nous l'avons fait dans l'équation (3.43). Nous obtenons :

$$\frac{\mu_\downarrow}{E_F} = \frac{1}{\pi} \left[y - \frac{\pi}{2} y^2 + (1 + y^2) \arctan y \right]. \quad (3.61)$$

Ainsi, comme nous l'avons déjà observé lorsque les masses sont égales ou dans le cas de la dimension 3, le potentiel chimique est une fonction totalement régulière, l'apparition

de l'état lié pour $y < 0$ (en dimension 1) ne provoquant aucune singularité. Remarquons enfin que ce résultat est simplement la moitié de celui obtenu à l'aide de l'ansatz de Bethe pour des masses égales (cf. équation (3.43)), pourvu que nous utilisions la masse réduite m_r dans la définition de y , c'est-à-dire $y = m_r g / k_F = -1/k_F a$. En particulier, nous pouvons en déduire immédiatement les développements de μ_\downarrow dans la limite de couplage faible $g \rightarrow 0$:

$$\mu_\downarrow = gn_\uparrow - \frac{m_\uparrow g^2}{4} + \frac{m_\uparrow^2 g^3}{3\pi k_F} + o(g^3), \quad (3.62)$$

et dans la limite d'attraction forte $g \rightarrow -\infty$:

$$\mu_\downarrow = -\epsilon_b - \frac{E_F}{2} + \frac{ak_F^3}{3\pi m_\uparrow} + o(k_F a). \quad (3.63)$$

Dans la limite $g \rightarrow 0$, le terme d'ordre 2 en g est en accord avec celui de l'équation (3.17) que nous avons obtenue en ne prenant en compte qu'une seule paire particule-trou. En effet, nous avons alors $\alpha = 1$ et $\text{Li}_2(1) = \pi^2/6$, $\text{Li}_2(-1) = \pi^2/12$. Nous observons que, dans la limite d'attraction forte, le terme d'ordre 0 n'est pas le même que lorsque les masses sont égales (cf. équation (3.45)); nous avons alors trouvé $-E_F$. Indiquons que dans le chapitre 5, nous montrerons que pour l'état lié en dimension 3 ce terme constant vaut toujours $-E_F$ et donnerons une interprétation physique simple de cette propriété.

3.3.2 Densité locale de l'espèce majoritaire

Comme nous l'avons fait en dimension 3, nous pouvons ensuite déterminer la densité locale des atomes \uparrow . Puisque nous avons déjà obtenu les fonctions d'onde des différents états occupés, cela ne pose aucune difficulté. Nous trouvons :

$$\frac{n_\uparrow(x)}{n_\uparrow} = 1 - \pi y e^{2k_F|x|y} \theta(-y) + \int_0^1 [\cos^2(uk_F|x| - \text{arccot}(u/y)) - \cos^2(uk_F x)] du. \quad (3.64)$$

Sans interaction $y = 0$, nous avons donc naturellement $n_\uparrow(x) = n_\uparrow$, alors que pour $y \rightarrow \pm\infty$, il vient $n_\uparrow(x) = n_\uparrow [1 - \sin(2k_F x)/(2k_F x)]$ (avec un pic de Dirac supplémentaire centré en 0 pour $y = -\infty$). Nous obtenons donc à nouveau les oscillations de Friedel.

Dans le cas général, nous représentons sur la figure 3.8 $n_\uparrow(x)/n_\uparrow$ pour différentes valeurs de l'interaction. L'expression (3.64) semble relativement proche de celle donnée par l'ansatz de Bethe lorsque les masses sont égales (c.f équation (3.54)). En particulier, de manière surprenante, nous trouvons que la valeur de $n_\uparrow(0)/n_\uparrow$ est la même que celle que nous avons obtenue (cf. équation (3.56)), à condition d'utiliser la masse réduite m_r dans la définition de y , c'est-à-dire $y = m_r g / k_F = -1/k_F a$. Notons qu'elle est cependant qualitativement différente. En effet, $n_\uparrow(x)$ oscille ici autour de n_\uparrow alors que pour $m_\downarrow = m_\uparrow$ nous avons observé que la densité locale est toujours supérieure à n_\uparrow lorsque l'interaction est attractive et toujours inférieure à n_\uparrow lorsqu'elle est répulsive.

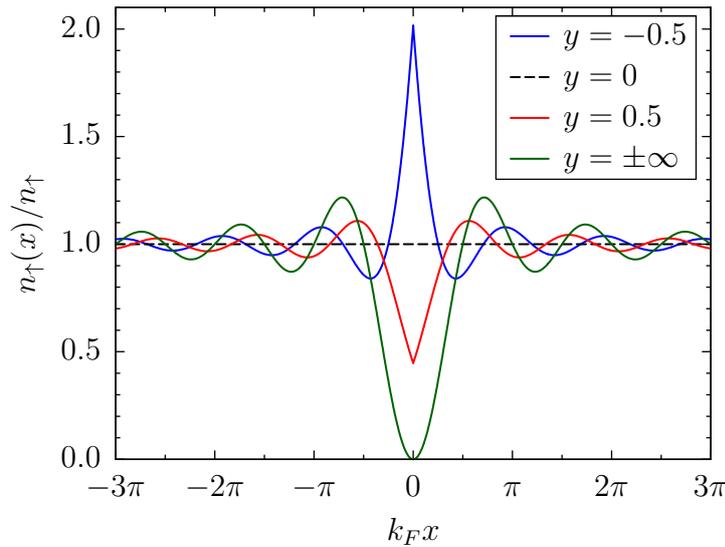


FIG. 3.8: Densité locale des atomes \uparrow en fonction de $k_F x$, lorsque $m_\downarrow = \infty$, pour différentes valeurs de l'interaction $y = m_\uparrow g/k_F = -1/k_F a$.

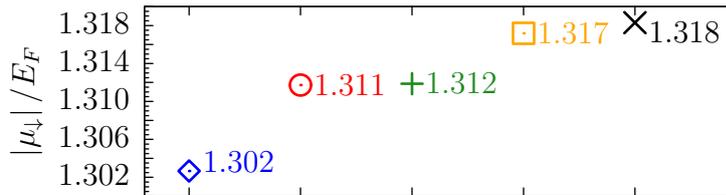


FIG. 3.9: Potentiel chimique de l'atome \downarrow lorsque $m_\downarrow = \infty$ et $m_\uparrow g/k_F = -1$, correspondant à notre série d'approximations successives. Losange : ordre 1. Rond : ordre 2 avec $E_{0,kk'qq'}^{(2)} \approx E_{0,kk'00}^{(2)}$. Plus : ordre 2 avec $E_{0,kk'qq'}^{(2)} \approx E_{0,kk'q0}^{(2)}$. Carré : ordre 2 sans approximation (variationnel). Croix : solution exacte.

3.3.3 Comparaison au développement paires particule-trou

À nouveau, nous pouvons comparer les résultats donnés par la résolution des équations (3.13) à (3.15) à la solution exacte du problème. Notre série d'approximations successives est représentée sur la figure 3.9 lorsque $m_\uparrow g/k_F = -1$. Ainsi, le résultat à l'ordre 2 $\mu_\downarrow = -1.317 E_F$ est en excellent accord avec la solution exacte $\mu_\downarrow = -(1 + 1/\pi)E_F \simeq -1.318 E_F$. Si nous représentons le potentiel chimique en fonction de l'interaction, nous obtenons des courbes similaires à celles de la figure 3.3 où il est impossible de distinguer l'ordre 2 de la solution exacte. Nous représentons sur la figure 3.10 nos résultats en retranchant la contribution dominante $-\epsilon_b$ lorsque l'interaction est attractive. En particulier, nous voyons que lorsque l'interaction est répulsive, nos résultats deviennent de moins en moins bons lorsque la constante de couplage g augmente. Cependant la détérioration est moins importante que lorsque les masses sont égales (cf. figure 3.6). Nous observons également que lorsque g passe de $-\infty$ à $+\infty$, la variation du potentiel

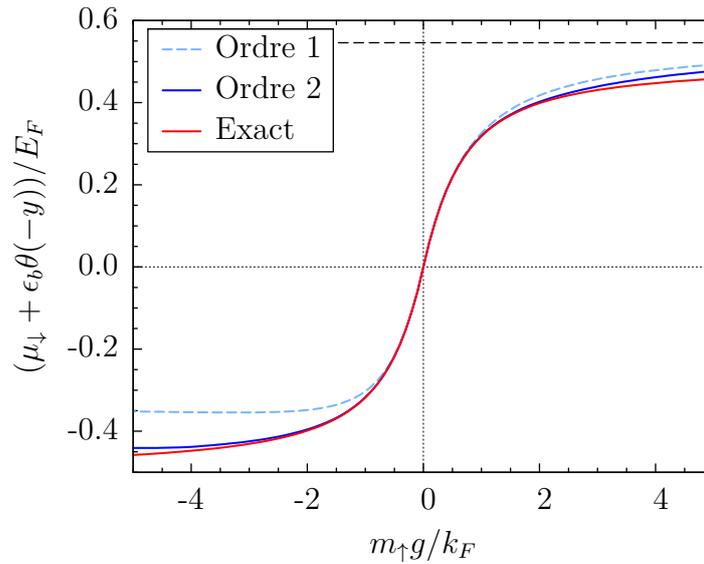


FIG. 3.10: Potentiel chimique de l'atome \downarrow lorsque $m_{\downarrow} = \infty$ en fonction de $y = m_{\uparrow}g/k_F = -1/k_F a$. Lorsque l'interaction est attractive, nous avons retiré le terme dominant $-\epsilon_b$. À l'ordre 1 en tirets clairs, à l'ordre 2 en trait plein et solution exacte en rouge. Dans la limite de répulsion forte $g \rightarrow +\infty$, l'ordre 1 et l'ordre 2 donnent $\mu_{\downarrow} = 0.5457 E_F$ (indiqué par la ligne en tirets noirs) alors que le résultat exact est $\mu_{\downarrow} = 1/2 E_F$.

chimique exact est $\epsilon_b + E_F$. Cela résulte simplement du fait que les états de diffusion ont dans les deux situations les mêmes vecteurs d'onde (le déphasage $\delta(k)$ est $\pi/2 \pmod{\pi}$), la seule différence étant que pour $g \rightarrow -\infty$ nous avons un état lié supplémentaire d'énergie $-\epsilon_b$ et qu'un atome \uparrow a été transféré du niveau de Fermi vers cet état lié, expliquant le terme supplémentaire E_F . Nous retrouverons dans le chapitre 5 un résultat similaire pour le potentiel chimique de l'état lié en dimension 3. Remarquons de plus que cette variation devient $\epsilon_b + 2E_F$ lorsque les masses sont égales d'après l'expression (3.43).

3.4 Étude du cas général

Après l'étude de ces deux cas particuliers $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$ et $m_{\downarrow} = \infty$, nous revenons désormais au cas général des masses inégales. Il n'y a alors aucune solution exacte connue. De plus, l'expression du développement que nous avons obtenu dans la limite de couplage faible (cf. équation (3.44)) montre qu'il y a assez peu d'espoir d'obtenir dans le cas général des expressions aussi simples que (3.43) et (3.61). Indiquons que Girardeau et Minguzzi [GM09] ont affirmé avoir déterminé de manière exacte l'état fondamental et la fonction de corrélation de paire pour un rapport arbitraire des masses. Nous avons montré [GC10a] que leur calcul n'est en fait valable que dans la limite $m_{\downarrow} = \infty$. En particulier, à l'aide de simulations numériques, ils ont obtenu une fonction de corrélation de paire analogue à notre résultat analytique (3.64). Ils affirment de plus que cette fonction de corrélation ne dépend pas du rapport des masses, contredisant le résultat donné par

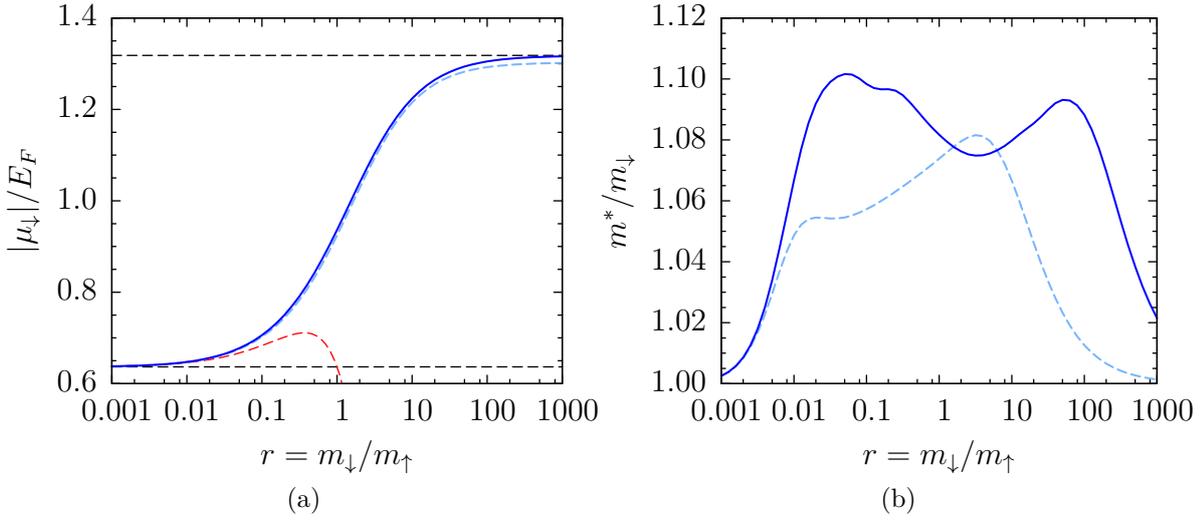


FIG. 3.11: Potentiel chimique (a) et masse effective (b) de l'atome \downarrow à l'ordre 1 et à l'ordre 2 en fonction du rapport des masses $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$ lorsque $m_{\uparrow}g/k_F = -1$. Dans la limite $r \rightarrow \infty$, $|\mu_{\downarrow}|$ tend vers $(1 + 1/\pi)E_F$ (cf. équation (3.61)) indiqué par la ligne en tirets noirs, alors que pour $r \rightarrow 0$, $|\mu_{\downarrow}|/E_F \simeq 2/\pi - 2r \ln r/\pi^2$ qui est représenté par la ligne en tirets rouges.

l'ansatz de Bethe (cf. équation (3.54)).

3.4.1 Résultats

Puisque nous avons vu que notre développement fournit des résultats très satisfaisants pour une interaction attractive ($g < 0$) lorsque nous pouvons les comparer aux solutions exactes, nous le généralisons maintenant sans difficulté au cas des masses inégales et obtenons ainsi une très bonne approximation du potentiel chimique et de la masse effective. Nous représentons sur la figure 3.11 nos résultats à l'ordre 1 et à l'ordre 2 en fonction du rapport des masses $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$ lorsque $m_{\uparrow}g/k_F = -1$. Pour cette valeur de l'interaction, nous trouvons que la variation du potentiel chimique est assez faible. Remarquons que les courbes à l'ordre 1 et à l'ordre 2 sont difficilement distinguables, renforçant l'idée que nos résultats sont essentiellement exacts.

Naturellement, dans la limite $r \rightarrow \infty$, nous trouvons que μ_{\downarrow} tend vers la valeur donnée par l'équation (3.61). Dans la limite $r \rightarrow 0$, à constante de couplage g fixée, nous trouvons que le potentiel chimique tend vers gn_{\uparrow} . En effet, dans ce cas, l'énergie cinétique de l'atome \downarrow tend vers l'infini dès que son impulsion est non nulle. Nous trouvons donc que $E_{p,kq}^{(1)}$ et $E_{p,kk'qq'}^{(2)}$ tendent vers l'infini, puis que α_{kq} et $\alpha_{kk'qq'}$ tendent vers 0 d'après les équations (3.14) et (3.15). Cet argument peut être généralisé à n'importe quel ordre dans notre série d'approximations successives ; il s'agit donc d'un résultat exact. Il est physiquement raisonnable, puisque cette limite peut également être vue comme le cas d'un unique atome \downarrow de masse m_{\downarrow} se déplaçant en présence de N particules \uparrow de masse infinie. Il n'y a alors aucune dynamique associée aux particules \uparrow , et il est donc naturel de trouver uniquement le terme de champ moyen gn_{\uparrow} pour le potentiel chimique μ_{\downarrow} . Nous

pouvons calculer ensuite la première correction à l'aide de l'équation (3.14). En effet, à l'ordre dominant, nous trouvons :

$$\alpha_{kq} = -\frac{g}{E_{q-k} + \epsilon_k - \epsilon_q}, \quad (3.65)$$

qui est identique à l'équation (3.16). Le calcul de l'intégrale sur q et k dans l'équation (3.14) nous donne donc la même expression que (3.17). En effectuant un développement de cette expression pour $r \rightarrow 0$, nous trouvons enfin :

$$\mu_{\downarrow} = gn_{\uparrow} + \frac{m_{\uparrow}g^2}{\pi^2}r \ln r + O(r), \quad (3.66)$$

que nous avons indiqué sur la figure 3.11.

Comme nous pouvons le voir sur la figure 3.11-(b), les variations de la masse effective sont très faibles pour la constante de couplage considérée. Dans les deux limites $r \rightarrow 0$ et $r \rightarrow \infty$, nous trouvons que la masse effective tend vers la masse de la particule libre $m^* = m_{\downarrow}$. Nous observons que le changement entre l'ordre 1 et l'ordre 2 est plus important que pour le potentiel chimique. En particulier, l'évolution de la structure détaillée à des ordres plus élevés ne semble pas claire. Comme précédemment, la masse effective apparaît donc plus sensible à notre approximation.

3.4.2 Limite de répulsion forte

Nous terminerons ce chapitre en étudiant la limite de répulsion forte $g \rightarrow +\infty$. Comme nous l'avons vu dans les deux cas particuliers $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$ et $m_{\downarrow} = \infty$, dans cette limite les potentiels chimiques donnés par nos approximations à l'ordre 1 et 2 convergent vers la même valeur. Nous pouvons déterminer cette valeur limite en effectuant un développement en puissances de $1/g$. Pour cela, nous considérons nos équations à l'ordre 1, c'est-à-dire les équations (3.13) et (3.14) où la dernière somme de l'équation (3.14) est omise, et développons α_{kq} en puissances de $1/y$ avec $y = m_r g/k_F$:

$$\alpha_{kq} = \alpha_{kq}^{(0)} + \alpha_{kq}^{(1)}/y + \dots \quad (3.67)$$

En identifiant les différents termes à l'ordre 0 dans les équations (3.13) et (3.14), nous trouvons :

$$-n_{\uparrow} = \sum'_{KQ} \alpha_{KQ}^{(0)}, \quad (3.68)$$

et

$$-n_{\uparrow}\alpha_{kq}^{(0)} = 1 + \sum'_K \alpha_{Kq}^{(0)} - \sum'_Q \alpha_{kQ}^{(0)}. \quad (3.69)$$

Puisque dans l'équation (3.69) la somme sur K est convergente, nous déduisons $\alpha_{kq}^{(0)} \rightarrow 0$ pour $k \rightarrow \infty$. Nous prenons ensuite la limite $k \rightarrow \infty$ de cette équation et obtenons $\sum'_K \alpha_{Kq}^{(0)} = -1$. En utilisant à nouveau l'équation (3.69), nous trouvons donc que $\alpha_{kq}^{(0)} \equiv \alpha_k^{(0)}$ ne dépend pas de q . Remarquons également qu'après sommation sur q de la relation $\sum'_K \alpha_{Kq}^{(0)} = -1$, nous obtenons exactement l'équation (3.68).

À l'ordre 1 en $1/y$, nous trouvons ensuite :

$$\mu_{\downarrow} = \frac{k_F}{m_r} \sum'_{KQ} \alpha_{KQ}^{(1)}, \quad (3.70)$$

et

$$(-\mu_{\downarrow} + E_{q-k} + \epsilon_k - \epsilon_q) \alpha_k^{(0)} = \frac{k_F}{m_r} \left[-\sum'_{K} \alpha_{Kq}^{(1)} + \sum'_{Q} \alpha_{kQ}^{(1)} - n_{\uparrow} \alpha_{kq}^{(1)} \right], \quad (3.71)$$

où nous avons regroupé les coefficients à l'ordre 1 dans le membre de droite. Nous pouvons maintenant sommer l'équation (3.71) sur q . Les deux derniers termes du membre de droite se compensent alors, et en utilisant l'équation (3.70), nous trouvons :

$$n_{\uparrow} \left(-\mu_{\downarrow} + k^2/(2m_r) + (1/r - 1)E_F/3 \right) \alpha_k^{(0)} = -\mu_{\downarrow}. \quad (3.72)$$

Enfin, en utilisant la relation $\sum'_k \alpha_k^{(0)} = -1$, nous obtenons l'équation :

$$C = \gamma \rho \operatorname{argth} C, \quad \text{avec } C = \sqrt{\gamma \rho + \alpha/3}, \quad (3.73)$$

où nous avons utilisé les notations que nous avons déjà introduites $\rho = \mu_{\downarrow}/E_F$, $\gamma = m_{\downarrow}/M$ et $\alpha = (m_{\downarrow} - m_{\uparrow})/(m_{\downarrow} + m_{\uparrow})$. La résolution numérique de cette équation ne pose aucune difficulté. Pour des masses égales $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$, nous trouvons $\mu_{\downarrow} = 1.389 E_F$ alors que l'équation (3.43) montre que le résultat exact est $\mu_{\downarrow} = E_F$. De même, lorsque $m_{\downarrow} = \infty$, nous obtenons $\mu_{\downarrow} = 0.5457 E_F$ alors que la valeur exacte est $\mu_{\downarrow} = E_F/2$. De plus, comme nous l'avons observé numériquement, nous pouvons également montrer que notre approximation à l'ordre 2 ne modifie pas cette valeur limite. Cela résulte à nouveau de l'antisymétrie de $\alpha_{kk'qq'}$ sous l'échange de q et q' . Ainsi, notre développement faisant intervenir un nombre croissant de paires particule-trou est mal adapté à ce régime d'interaction répulsive (au-delà de la zone de couplage faible). Nous avons déjà remarqué ce point lors du calcul de la masse effective.

Introduction aux méthodes diagrammatiques

Nous présentons dans ce chapitre les techniques diagrammatiques usuelles pour la résolution du problème à N -corps. Ce formalisme est fondé sur l'usage des fonctions de Green du système décrivant la propagation d'une ou de plusieurs particules. Nous indiquons ici les différentes étapes de la construction de la théorie. Les détails trop techniques et ceux qui ne nous seront pas strictement utiles dans le chapitre 5 sont donnés en annexe. Nous renvoyons également le lecteur souhaitant avoir plus de précisions à [AGD76, FW71]. Dans une première partie, nous rappelons les propriétés générales de ces propagateurs à température nulle, puis à température finie. Nous présentons ensuite les méthodes de perturbation qui nous permettent de développer ces fonctions de Green selon une série infinie de termes. Chacun de ces termes décrit des processus d'interactions multiples entre particules et peut être représenté à l'aide de diagrammes de Feynman. Nous utilisons ici le formalisme à température finie ou formalisme de Matsubara et établissons les règles permettant l'évaluation de la fonction de Green à n'importe quel ordre. Enfin, dans une dernière partie, nous appliquons ces techniques à deux situations simples : le problème à deux et trois corps.

4.1 Propriétés générales des fonctions de Green

4.1.1 Définition

Considérons un gaz de fermions uniforme, contenant $N = N_{\downarrow} + N_{\uparrow}$ particules de spin $s = 1/2$. Nous notons \mathcal{V} le volume du système que nous supposons très grand et ferons tendre vers l'infini à densité de particules $n = N/\mathcal{V}$ fixée pour obtenir la limite thermodynamique. Nous nous plaçons pour le moment à température nulle ($T = 0$), le formalisme à température finie, que nous utiliserons en pratique, sera exposé dans la section 4.1.5. Notons H l'Hamiltonien du système à N -corps et $|\Psi_0\rangle$ son état fondamental (c'est-à-dire en tenant compte de toutes les interactions). La fonction d'onde $|\Psi_0\rangle$ peut être obtenue en minimisant $\langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle$ avec la contrainte $\langle\Psi_0|\hat{N}_{\sigma}|\Psi_0\rangle = N_{\sigma}$ où nous avons noté \hat{N}_{σ} l'opérateur nombre de particules de spin σ . De manière équivalente, nous

pouvons employer la méthode des multiplicateurs de Lagrange qui consiste à minimiser $\langle \Psi_0 | H - \mu_\uparrow \hat{N}_\uparrow - \mu_\downarrow \hat{N}_\downarrow | \Psi_0 \rangle$ où les potentiels chimiques μ_σ sont des constantes déterminées par la condition $\langle \Psi_0 | \hat{N}_\sigma | \Psi_0 \rangle = N_\sigma$. Ainsi, nous utiliserons dans ce chapitre l'Hamiltonien dans l'ensemble grand canonique $H' = H - \mu_\uparrow \hat{N}_\uparrow - \mu_\downarrow \hat{N}_\downarrow$. La fonction de Green à une particule et à température nulle est définie par :

$$G_\sigma(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = -i \langle \Psi_0 | T \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t') | \Psi_0 \rangle, \quad (4.1)$$

où $\psi_\sigma(\mathbf{r}, t)$ et $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t')$ sont les opérateurs destruction et création d'une particule en \mathbf{r} de spin σ en représentation d'Heisenberg : $\psi_\sigma(\mathbf{r}, t) = e^{iH't} \psi_\sigma(\mathbf{r}) e^{-iH't}$. T est l'opérateur d'ordonnancement chronologique qui a pour effet de ranger les facteurs de telle sorte que la variable temps croisse de droite à gauche. De plus, pour des opérateurs fermioniques, l'opération s'accompagne d'un changement de signe à chaque permutation. Nous avons ainsi :

$$T \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t') = \begin{cases} \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t') & \text{si } t' < t \\ -\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t') \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) & \text{si } t' > t \end{cases}. \quad (4.2)$$

Nous utiliserons souvent par la suite la notation condensée $G_\sigma(x, x')$ où x tient compte des quatre variables \mathbf{r} et t . Pour un système homogène en l'absence de champ extérieur et dont l'Hamiltonien est indépendant du temps, l'invariance translationnelle montre que la fonction de Green ne dépend que de la différence $x - x'$. Nous pouvons maintenant introduire la représentation de Fourier de G_σ :

$$G_\sigma(x - x') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} G_\sigma(\mathbf{p}, t - t') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i[\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \omega(t - t')]} G_\sigma(\mathbf{p}, \omega). \quad (4.3)$$

Ainsi, l'expression de l'opérateur destruction d'une particule en \mathbf{r} :

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}\sigma} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.4)$$

montre que $G_\sigma(\mathbf{p}, t - t')$ est donné par :

$$G_\sigma(\mathbf{p}, t - t') = -i \langle \Psi_0 | T c_{\mathbf{p}\sigma}(t) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') | \Psi_0 \rangle. \quad (4.5)$$

• **Particules sans interaction.** — Calculons maintenant la fonction de Green d'un système de particules sans interaction $G_{0\sigma}(\mathbf{p}, \omega)$. L'Hamiltonien s'écrit alors :

$$H'_0 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} (\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma}, \quad (4.6)$$

où $\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) = p^2/2m_\sigma$ est l'énergie cinétique d'une particule libre de vecteur d'onde \mathbf{p} . L'état fondamental $|\Psi_0\rangle$ est dans ce cas très simple, c'est une mer de Fermi : les états de vecteur d'onde $p < k_F^\sigma$ sont remplis, ceux tels que $p > k_F^\sigma$ sont vides. k_F^σ est le vecteur d'onde de Fermi des particules de spin σ ; il s'obtient à partir du nombre de particules $N_\sigma/\mathcal{V} = k_F^\sigma{}^3/6\pi^2$. En utilisant la relation $[H'_0, c_{\mathbf{p}\sigma}] = -(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma) c_{\mathbf{p}\sigma}$, nous vérifions

en outre facilement que :

$$c_{\mathbf{p}\sigma}(t) = e^{-i(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)t} c_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (4.7)$$

Ainsi, à l'aide de l'équation (4.5), nous obtenons pour $t > t'$:

$$G_{0\sigma}(\mathbf{p}, t - t') = -ie^{-i(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)(t - t')} \theta(p - k_F^\sigma), \quad (4.8)$$

et pour $t < t'$:

$$G_{0\sigma}(\mathbf{p}, t - t') = ie^{-i(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)(t - t')} \theta(k_F^\sigma - p), \quad (4.9)$$

où nous avons noté θ la fonction de Heaviside. Ces deux dernières expressions correspondent à la représentation de Fourier :

$$G_{0\sigma}(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + \mu_\sigma + i\delta \operatorname{sgn}(p - k_F^\sigma)}, \quad (4.10)$$

avec $\delta \rightarrow 0^+$. Pour s'en convaincre, il suffit d'effectuer l'intégration sur ω dans l'équation (4.3) en fermant le contour d'intégration pour $\operatorname{Im} \omega < 0$ si $t > t'$ et $\operatorname{Im} \omega > 0$ si $t < t'$. Nous remarquons l'existence d'un pôle pour $\omega = \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma - i\delta \operatorname{sgn}(p - k_F^\sigma)$: nous généraliserons ce résultat par la suite en montrant que les pôles de G donnent l'énergie des quasi-particules.

• **Interprétation physique.** — Supposons $t > t'$. Mis à part le facteur $-i$, d'après l'équation (4.5), $G_\sigma(\mathbf{p}, t - t')$ est le produit scalaire des deux états :

$$c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t')|\Psi_0\rangle \quad \text{et} \quad c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t)|\Psi_0\rangle. \quad (4.11)$$

Le sens physique de G est alors clair : G est l'amplitude de probabilité pour que, ayant ajouté à l'état de base une particule d'impulsion \mathbf{p} à l'instant t' , on la retrouve avec la même impulsion à l'instant t , sans autre modification de l'état de base $|\Psi_0\rangle$. Notons de plus que les états précédents ne sont pas normalisés, leur norme fournit la probabilité de pouvoir créer une particule d'impulsion \mathbf{p} en plus de l'état de base (ce qui n'est pas toujours possible à cause du principe d'exclusion). Ainsi, la fonction G peut se décomposer en trois éléments : la probabilité d'existence de $c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t')|\Psi_0\rangle$, la probabilité d'évolution de $c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t')|\Psi_0\rangle$ vers $c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t)|\Psi_0\rangle$ et la probabilité d'existence de $c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t)|\Psi_0\rangle$. Pour $t > t'$, G décrit donc la propagation d'une particule supplémentaire, d'où son nom de propagateur.

Supposons maintenant $t < t'$. À un facteur i près, G est alors le produit scalaire des états :

$$c_{\mathbf{p}\sigma}(t)|\Psi_0\rangle \quad \text{et} \quad c_{\mathbf{p}\sigma}(t')|\Psi_0\rangle. \quad (4.12)$$

Ces états contiennent $(N - 1)$ particules (au lieu de $(N + 1)$ dans le cas $t > t'$) et G décrit la propagation d'un trou d'impulsion \mathbf{p} entre les instants t et t' .

4.1.2 Représentation spectrale, propriétés analytiques

Nous étudions maintenant la structure analytique de la fonction de Green pour un système de particules avec interaction. Pour alléger les notations, nous omettons dans

cette section l'indice de spin σ . Considérons d'abord le cas $t > t'$ et introduisons l'ensemble des états propres du système à $(N + 1)$ particules. Soit $|\Psi_\alpha^{(N+1)}\rangle$ un de ces états d'énergie $E_\alpha^{(N+1)}$. À l'aide d'une relation de fermeture, l'équation (4.5) donne :

$$G(\mathbf{p}, t - t') = -i \sum_{\alpha} \langle \Psi_0 | c_{\mathbf{p}}(t) | \Psi_\alpha^{(N+1)} \rangle \langle \Psi_\alpha^{(N+1)} | c_{\mathbf{p}}^\dagger(t') | \Psi_0 \rangle. \quad (4.13)$$

En explicitant la représentation d'Heisenberg des opérateurs, et en utilisant :

$$H'|\Psi_0\rangle = (E_0^{(N)} - \mu N)|\Psi_0\rangle, \quad H'|\Psi_\alpha^{(N+1)}\rangle = (E_\alpha^{(N+1)} - \mu(N + 1))|\Psi_\alpha^{(N+1)}\rangle, \quad (4.14)$$

nous obtenons :

$$G(\mathbf{p}, t - t') = -i \sum_{\alpha} e^{-i(E_\alpha^{(N+1)} - E_0^{(N)} - \mu)(t - t')} \left| \langle \Psi_\alpha^{(N+1)} | c_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2, \quad t > t'. \quad (4.15)$$

Nous pouvons effectuer un calcul analogue pour $t < t'$ en introduisant les états propres du système à $(N - 1)$ particules :

$$G(\mathbf{p}, t - t') = i \sum_{\beta} e^{i(E_\beta^{(N-1)} - E_0^{(N)} + \mu)(t - t')} \left| \langle \Psi_\beta^{(N-1)} | c_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle \right|^2, \quad t < t'. \quad (4.16)$$

Nous voyons apparaître dans ces expressions deux énergies :

$$\epsilon_\alpha^{(+)} = E_\alpha^{(N+1)} - (E_0^{(N)} + \mu) \quad \text{et} \quad \epsilon_\beta^{(-)} = E_\beta^{(N-1)} - (E_0^{(N)} - \mu). \quad (4.17)$$

En négligeant les corrections d'ordre $1/N$, nous avons $E_0^{(N+1)} - E_0^{(N)} \simeq E_0^{(N)} - E_0^{(N-1)} \simeq \mu$. Ainsi, $\epsilon_\alpha^{(+)}$ représente l'énergie d'excitation par rapport à l'état fondamental ayant le même nombre de particules, c'est-à-dire $(N + 1)$, $\epsilon_\alpha^{(+)}$ est donc positive. De même, $\epsilon_\beta^{(-)}$ correspond à l'énergie d'excitation pour des états à $(N - 1)$ particules, elle est donc également positive. D'après les équations (4.15) et (4.16), l'évolution temporelle de la fonction de Green fait intervenir les fréquences positives $\epsilon_\alpha^{(+)}$ et les fréquences négatives $-\epsilon_\beta^{(-)}$. C'est effectivement ce que nous obtenons lorsque nous calculons sa représentation de Fourier :

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \sum_{\alpha} \frac{\left| \langle \Psi_\alpha^{(N+1)} | c_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2}{\omega - \epsilon_\alpha^{(+)} + i\delta} + \sum_{\beta} \frac{\left| \langle \Psi_\beta^{(N-1)} | c_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle \right|^2}{\omega + \epsilon_\beta^{(-)} - i\delta}, \quad \delta \rightarrow 0^+. \quad (4.18)$$

Définissons maintenant la densité spectrale du système :

$$A(\mathbf{p}, \omega) = \sum_{\alpha} \left| \langle \Psi_\alpha^{(N+1)} | c_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2 \delta(\omega - \epsilon_\alpha^{(+)}) + \sum_{\beta} \left| \langle \Psi_\beta^{(N-1)} | c_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle \right|^2 \delta(\omega + \epsilon_\beta^{(-)}). \quad (4.19)$$

Cette fonction est réelle, positive et normalisée. En effet :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\mathbf{p}, \omega) &= \sum_{\alpha} \left| \langle \Psi_\alpha^{(N+1)} | c_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2 + \sum_{\beta} \left| \langle \Psi_\beta^{(N-1)} | c_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle \right|^2 \\ &= \langle \Psi_0 | c_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | c_{\mathbf{p}}^\dagger c_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle = 1, \end{aligned} \quad (4.20)$$

où la dernière égalité provient de l'anticommutation $\{c_{\mathbf{p}}, c_{\mathbf{p}}^\dagger\} = 1$. L'interprétation physique de A est simple. Si nous effectuons une analyse spectrale de l'état $c_{\mathbf{p}}^\dagger|\Psi_0\rangle$, la norme totale de cet état est distribuée entre les différentes fréquences, la densité de norme à la fréquence $\omega > 0$ est donnée par $A(\mathbf{p}, \omega)$. De même, pour $\omega < 0$, $A(\mathbf{p}, \omega)$ est la densité de norme obtenue à partir de l'analyse spectrale de l'état $c_{\mathbf{p}}|\Psi_0\rangle$. Calculons par exemple la densité spectrale d'un système de particules sans interaction. Les seuls états ayant un recouvrement non nuls dans l'équation (4.19) sont $|\Psi_\alpha^{(N+1)}\rangle = c_{\mathbf{p}}^\dagger|\Psi_0\rangle$ si $p > k_F$ et $|\Psi_\beta^{(N-1)}\rangle = c_{\mathbf{p}}|\Psi_0\rangle$ si $p < k_F$, correspondant respectivement à $\epsilon_\alpha^{(+)} = \epsilon(\mathbf{p}) - \mu$ et $\epsilon_\beta^{(-)} = \mu - \epsilon(\mathbf{p})$. Nous trouvons donc que la densité spectrale se réduit alors à une seule fonction de Dirac : $A(\mathbf{p}, \omega) = \delta(\omega - \epsilon(\mathbf{p}) + \mu)$.

Nous pouvons désormais écrire l'équation (4.18) sous la forme très simple :

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{A(\mathbf{p}, \omega')}{\omega - \omega' + i\delta \operatorname{sgn}(\omega')}, \quad (4.21)$$

appelée représentation spectrale ou développement de Lehmann. Indiquons également l'expression de l'évolution temporelle de la fonction de Green G en fonction de A correspondant aux équations (4.15) et (4.16) :

$$G(\mathbf{p}, t - t') = -i\theta(t - t') \int_0^{+\infty} d\omega A(\mathbf{p}, \omega) e^{-i\omega(t-t')} + i\theta(t' - t) \int_{-\infty}^0 d\omega A(\mathbf{p}, \omega) e^{-i\omega(t-t')}. \quad (4.22)$$

La relation (4.21) va nous permettre d'étudier les propriétés analytiques de G . Tout d'abord, à cause de la normalisation de A , nous obtenons le comportement asymptotique :

$$G(\mathbf{p}, \omega) \sim \frac{1}{\omega}, \quad \text{pour } |\omega| \rightarrow \infty. \quad (4.23)$$

En utilisant l'expression classique :

$$\frac{1}{x + i0^+} = \text{P}\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x), \quad (4.24)$$

où $\text{P}(1/x)$ est la partie principale de $1/x$, nous pouvons séparer les parties réelles et imaginaires de G (pour ω réelle) :

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \mathcal{f} d\omega' \frac{A(\mathbf{p}, \omega')}{\omega - \omega'} - i\pi \operatorname{sgn}(\omega) A(\mathbf{p}, \omega), \quad (4.25)$$

où \mathcal{f} est la notation usuelle pour l'intégrale au sens de la valeur principale.

L'expression (4.21) nous permet d'étendre naturellement la définition de la fonction $G(\mathbf{p}, \omega)$ au plan complexe des fréquences. Lorsque $\operatorname{Im} \omega \neq 0$, nous pouvons omettre le terme $i\delta$ au dénominateur. Puisque la densité spectrale est réelle et positive, nous en déduisons alors :

$$G(\mathbf{p}, \bar{\omega}) = \overline{G(\mathbf{p}, \omega)} \quad \text{et} \quad (4.26)$$

$$\operatorname{Im} G(\mathbf{p}, \omega) = -\operatorname{Im} \omega \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{A(\mathbf{p}, \omega')}{(\operatorname{Re} \omega - \omega')^2 + (\operatorname{Im} \omega)^2} \neq 0, \quad \text{si } \operatorname{Im} \omega \neq 0. \quad (4.27)$$

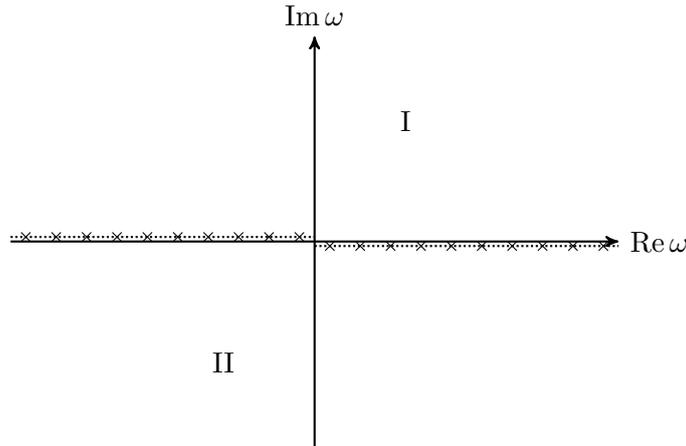


FIG. 4.1: Représentation des singularités de $G(\mathbf{p}, \omega)$ dans le plan complexe des fréquences.

Ainsi, les zéros de G sont tous situés sur l'axe réel. Puisque la fonction A est intégrable, l'expression (4.21) montre également que G est analytique dans les deux demi-plans $\text{Im } \omega > 0$ et $\text{Im } \omega < 0$, ses seules singularités se situent donc sur l'axe réel. La nature de ces singularités va dépendre de la densité spectrale. De manière générale, A peut se décomposer en une partie discrète somme de fonctions de Dirac (comme pour le gaz sans interaction) et une partie continue. Une fonction de Dirac $\delta(\omega' - \xi_{\mathbf{p}})$ donnera un pôle discret de G pour $\omega = \xi_{\mathbf{p}} - i\delta$ si $\xi_{\mathbf{p}} > 0$ et $\omega = \xi_{\mathbf{p}} + i\delta$ si $\xi_{\mathbf{p}} < 0$. De la même manière, la partie continue donnera une coupure de G sur l'intervalle où A ne s'annule pas. Cette coupure sera située au-dessous de l'axe réel si $\omega > 0$ et au-dessus si $\omega < 0$. La figure 4.1 résume la localisation des singularités de G dans le plan complexe des fréquences. À l'aide des équations (4.25) et (4.26), nous pouvons calculer la discontinuité au niveau de la coupure :

$$G(\mathbf{p}, \omega + i0^+) - G(\mathbf{p}, \omega - i0^+) = -2i\pi A(\mathbf{p}, \omega), \quad \text{pour } \omega \in \mathbb{R}. \quad (4.28)$$

Cette égalité nous permet d'exprimer la densité spectrale en fonction des valeurs de G en dehors de l'axe réel :

$$A(\mathbf{p}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G(\mathbf{p}, \omega + i0^+) = \frac{1}{\pi} \text{Im } G(\mathbf{p}, \omega - i0^+), \quad \omega \in \mathbb{R}. \quad (4.29)$$

La simple lecture de la figure 4.1 nous indique également comment obtenir la valeur de $G(\mathbf{p}, \omega)$ sur l'axe réel à l'aide de ses valeurs en dehors de l'axe :

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \begin{cases} G(\mathbf{p}, \omega + i0^+) & \text{si } \omega > 0 \\ G(\mathbf{p}, \omega - i0^+) & \text{si } \omega < 0 \end{cases}, \quad \omega \in \mathbb{R}. \quad (4.30)$$

Ces deux dernières relations nous seront utiles pour calculer A et G à partir de la fonction de Green à température finie.

Enfin, nous introduisons deux nouvelles fonctions de Green qui sont continues respectivement dans les demi-plans $\text{Im } \omega \geq 0$ et $\text{Im } \omega \leq 0$. Nous les utiliserons notamment

pour réaliser des intégrations sur des contours. Elles sont définies par :

$$\begin{aligned} G_R(x - x') &= -i \langle \Psi_0 | \psi(x) \psi^\dagger(x') + \psi^\dagger(x') \psi(x) | \Psi_0 \rangle \theta(t - t'), \\ G_A(x - x') &= i \langle \Psi_0 | \psi(x) \psi^\dagger(x') + \psi^\dagger(x') \psi(x) | \Psi_0 \rangle \theta(t' - t). \end{aligned} \quad (4.31)$$

G_R est appelée fonction de Green retardée et G_A fonction de Green avancée. De la même manière que pour G , nous obtenons les représentations spectrales pour $\omega \in \mathbb{R}$:

$$G_R(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{A(\mathbf{p}, \omega')}{\omega - \omega' + i\delta} \quad \text{et} \quad G_A(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{A(\mathbf{p}, \omega')}{\omega - \omega' - i\delta}. \quad (4.32)$$

Ainsi, si $\omega > 0$, le facteur de convergence $\pm i\delta$ ne joue aucun rôle lorsque $\omega' < 0$ dans les expressions de G et G_R et nous en déduisons alors que $G_R(\mathbf{p}, \omega) = G(\mathbf{p}, \omega)$. De même, si $\omega < 0$, nous avons $G_A(\mathbf{p}, \omega) = G(\mathbf{p}, \omega)$. Nous allons ensuite étendre G_R et G_A à l'ensemble du plan complexe des fréquences, mais d'une manière différente de celle utilisée pour G . Intéressons-nous d'abord à G_R . Pour $\text{Im} \omega \geq 0$, nous définissons $G_R(\mathbf{p}, \omega)$ par la formule (4.32). La fonction ainsi définie est analytique sur $\text{Im} \omega > 0$ et continue sur $\text{Im} \omega \geq 0$. Nous étendons ensuite le domaine de cette fonction à $\text{Im} \omega < 0$ par prolongement analytique. Pour $\text{Im} \omega < 0$, $G_R(\mathbf{p}, \omega)$ n'est donc en général pas donnée par la formule (4.32). De la même manière, nous définissons $G_A(\mathbf{p}, \omega)$ pour $\text{Im} \omega \leq 0$ à l'aide de la formule (4.32) et nous l'étendons ensuite à $\text{Im} \omega > 0$ par prolongement analytique. Ainsi, nous avons avec la définition (4.21) (cf. figure 4.1) :

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \begin{cases} G_R(\mathbf{p}, \omega) & \text{si } \omega \text{ est dans le domaine I} \\ G_A(\mathbf{p}, \omega) & \text{si } \omega \text{ est dans le domaine II} \end{cases}. \quad (4.33)$$

Illustrons maintenant ce résultat en calculant les différentes fonctions de Green lorsque A est une lorentzienne centrée en $\xi_{\mathbf{p}}$ et de largeur $2\Gamma_{\mathbf{p}}$:

$$A(\mathbf{p}, \omega) = \frac{\Gamma_{\mathbf{p}}/\pi}{(\omega - \xi_{\mathbf{p}})^2 + \Gamma_{\mathbf{p}}^2}. \quad (4.34)$$

Ce calcul simple nous sera utile par la suite et nous permet de préciser les différentes définitions que nous venons d'introduire. Pour $\text{Im} \omega \geq 0$, $G_R(\mathbf{p}, \omega)$ est donnée par :

$$G_R(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\Gamma_{\mathbf{p}}/\pi}{(\omega' - \xi_{\mathbf{p}})^2 + \Gamma_{\mathbf{p}}^2} \frac{1}{\omega - \omega' + i\delta}. \quad (4.35)$$

Cette intégrale est effectuée en fermant le contour d'intégration autour du demi-plan $\text{Im} \omega' \leq 0$, le seul pôle dans ce contour est $\omega' = \xi_{\mathbf{p}} - i\Gamma_{\mathbf{p}}$. Nous obtenons :

$$G_R(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} + i\Gamma_{\mathbf{p}}}. \quad (4.36)$$

Cette expression définit une fonction analytique sur l'ensemble du plan complexe des fréquences (en dehors du pôle $\xi_{\mathbf{p}} - i\Gamma_{\mathbf{p}}$). C'est donc le prolongement analytique cherché et $G_R(\mathbf{p}, \omega)$ est donnée par cette formule pour toute fréquence complexe ω . Insistons ici

à nouveau sur le fait que pour $\text{Im } \omega < 0$, $G_R(\mathbf{p}, \omega)$ n'est pas donnée par la relation (4.35). En effet, le calcul de l'intégrale réalisée en fermant le contour d'intégration autour du demi-plan $\text{Im } \omega' \geq 0$ donne alors une expression analogue à (4.36) mais avec le terme $-i\Gamma_{\mathbf{p}}$ au dénominateur. De la même manière que pour G_R , nous obtenons l'expression de la fonction de Green avancée pour toute fréquence ω :

$$G_A(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} - i\Gamma_{\mathbf{p}}} . \quad (4.37)$$

Nous déduisons alors $G(\mathbf{p}, \omega)$ à l'aide de l'équation (4.33). En particulier, pour ω réelle, nous avons :

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \begin{cases} \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} + i\Gamma_{\mathbf{p}}} & \text{si } \omega > 0 \\ \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} - i\Gamma_{\mathbf{p}}} & \text{si } \omega < 0 \end{cases} . \quad (4.38)$$

4.1.3 Relations entre G et les propriétés physiques du système

La connaissance de la fonction de Green, ou de manière équivalente, la densité spectrale, apporte de nombreuses informations sur le système considéré. Nous exposons dans cette section quelques propriétés qui nous seront utiles, nous renvoyons aux annexes A.1 et A.2 pour les détails.

• **Nombre de particules, population.** — La première information évidente que nous fournit G_{σ} est le nombre de particules. La définition de G_{σ} donne immédiatement :

$$n_{\sigma} \equiv \frac{N_{\sigma}}{\mathcal{V}} \equiv \langle \Psi_0 | \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x) | \Psi_0 \rangle = -i \lim_{\substack{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} \\ t' \rightarrow t^+}} G_{\sigma}(x - x') . \quad (4.39)$$

La transformée de Fourier de G_{σ} fournit également la population moyenne de l'onde plane de vecteur d'onde \mathbf{p} :

$$n_{\sigma\mathbf{p}} \equiv \langle \Psi_0 | c_{\mathbf{p}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}\sigma} | \Psi_0 \rangle = -i \lim_{t' \rightarrow t^+} G_{\sigma}(\mathbf{p}, t - t') = -i \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} G_{\sigma}(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^0 d\omega A_{\sigma}(\mathbf{p}, \omega), \quad (4.40)$$

que nous pouvons relier au nombre de particules :

$$N_{\sigma} = \sum_{\mathbf{p}} n_{\sigma\mathbf{p}} . \quad (4.41)$$

À l'aide de la population moyenne $n_{\sigma\mathbf{p}}$, il est alors possible de calculer les valeurs moyennes des opérateurs à un corps [AGD76].

• **Potentiel thermodynamique de l'état fondamental.** — Pour un opérateur à deux corps, le calcul de la valeur moyenne nécessite en général la connaissance de la fonction de Green à deux particules que nous définirons un peu plus loin. Cependant, lorsque

l'Hamiltonien ne fait intervenir que des processus d'interaction à deux corps, il est possible d'obtenir le potentiel thermodynamique de l'état fondamental à l'aide de la seule fonction de Green G_σ (cf. annexe A.1) :

$$\Omega \equiv \langle H' \rangle = -\frac{i}{2} \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} G_\sigma(\mathbf{p}, \omega) [\omega + \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma]. \quad (4.42)$$

Cette relation permet par exemple d'isoler naturellement la partie divergente de l'énergie d'un gaz de fermions ultrafroids et de retrouver la formule de Tan [Tan08] et le comportement en $1/k^4$ du nombre d'occupation $n_{\sigma\mathbf{k}}$ à grands vecteurs d'onde [CAL09].

• **Excitations élémentaires et pôles de G .** — L'énergie et la durée de vie des excitations élémentaires sont directement données par les pôles des prolongements G_R et G_A de la fonction de Green. Plus précisément, la densité spectrale $A(\mathbf{p}, \omega)$ se décompose de manière générale en une partie cohérente constituée d'un pic centré en $\xi_{\mathbf{p}}$, de largeur $2\Gamma_{\mathbf{p}}$ et de poids $z_{\mathbf{p}} \in [0, 1]$, et un fond incohérent de poids $1 - z_{\mathbf{p}}$. L'énergie $\xi_{\mathbf{p}}$ s'interprète comme l'énergie de la quasi-particule d'impulsion \mathbf{p} , $\Gamma_{\mathbf{p}}$ est sa durée de vie et $z_{\mathbf{p}}$ son résidu.

Comme nous l'avons vu sur le cas particulier (4.34), lorsque $\xi_{\mathbf{p}} > 0$, les quantités $\xi_{\mathbf{p}}$, $\Gamma_{\mathbf{p}}$ et $z_{\mathbf{p}}$ sont obtenues en déterminant le pôle $\xi_{\mathbf{p}} - i\Gamma_{\mathbf{p}}$ et le résidu au pôle $z_{\mathbf{p}}$ de $G_R(\mathbf{p}, \omega)$ dans le demi-plan $\text{Im } \omega \leq 0$ (G_R est analytique pour $\text{Im } \omega > 0$). De même, pour $\xi_{\mathbf{p}} < 0$, nous devons déterminer le pôle $\xi_{\mathbf{p}} + i\Gamma_{\mathbf{p}}$ et le résidu au pôle $z_{\mathbf{p}}$ de $G_A(\mathbf{p}, \omega)$ dans le demi-plan $\text{Im } \omega \geq 0$. Nous renvoyons à l'annexe A.2 pour une démonstration de ce résultat.

4.1.4 Fonction de Green à deux particules, équation de Dyson

Par analogie avec la fonction de Green G_σ , nous pouvons définir une fonction de Green à deux particules faisant intervenir quatre opérateurs champs. Son expression à l'aide des opérateurs $c_{\mathbf{p}\sigma}$ et $c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger$ est :

$$G_{\sigma_1\sigma_2,\sigma_3\sigma_4}^{\text{II}}(\mathbf{p}_1t_1, \mathbf{p}_2t_2; \mathbf{p}_3t_3, \mathbf{p}_4t_4) = \langle \Psi_0 | T c_{\mathbf{p}_1\sigma_1}(t_1) c_{\mathbf{p}_2\sigma_2}(t_2) c_{\mathbf{p}_3\sigma_3}^\dagger(t_3) c_{\mathbf{p}_4\sigma_4}^\dagger(t_4) | \Psi_0 \rangle. \quad (4.43)$$

Pour un système invariant par translation et dont le spin total est conservé, G^{II} n'est différent de zéro que si $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$ et $\sigma_1 + \sigma_2 = \sigma_3 + \sigma_4$. De plus, si l'Hamiltonien est indépendant du temps, G^{II} est invariant par translation simultanée des quatre variables de temps et ne dépend donc que de $t_1 - t_2$, $t_1 - t_3$ et $t_1 - t_4$. Enfin, les propriétés de l'opérateur chronologique montrent que seules trois composantes de G^{II} sont indépendantes $G_{\uparrow\uparrow,\uparrow\uparrow}^{\text{II}}$, $G_{\uparrow\downarrow,\uparrow\downarrow}^{\text{II}}$ et $G_{\downarrow\downarrow,\downarrow\downarrow}^{\text{II}}$, les autres s'en déduisant par multiplication par ± 1 et permutation des coordonnées $\mathbf{p}_i t_i$ correspondantes. Nous définissons donc $G_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_1t_1, \mathbf{p}_2t_2; \mathbf{p}_3t_3, \mathbf{p}_4t_4) \equiv G_{\sigma\sigma',\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_1t_1, \mathbf{p}_2t_2; \mathbf{p}_3t_3, \mathbf{p}_4t_4) = G_{\sigma'\sigma}^{\text{II}}(\mathbf{p}_2t_2, \mathbf{p}_1t_1; \mathbf{p}_4t_4, \mathbf{p}_3t_3)$ qui est symétrique sous l'échange de σ et σ' (avec la permutation correspondante des coordonnées $\mathbf{p}_i t_i$). De plus, dans toutes les fonctions de Green à deux particules que nous allons écrire, nous supposons implicitement que $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$.

Comme pour la fonction de Green à une particule, le sens physique de G^{II} dépend de

l'ordre des variables de temps. Si $t_1, t_2 > t_3, t_4$, G^{II} décrit la propagation d'une paire de particules supplémentaires et fournit des renseignements sur les états à $(N+2)$ particules. De même, le cas $t_1, t_2 < t_3, t_4$ correspond à la propagation d'une paire de trous (système à $(N-2)$ particules). Enfin, si $t_1, t_3 > t_2, t_4$, G^{II} décrit la propagation d'une paire particule-trou et nous renseigne sur les états excités à N particules, en particulier sur les états liés et les excitations collectives.

Nous établissons maintenant une équation dynamique reliant les fonctions de Green G et G^{II} . En écrivant la fonction de Green G_σ sous la forme :

$$iG_\sigma(\mathbf{p}, t - t') = \theta(t - t') \langle c_{\mathbf{p}\sigma}(t) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') \rangle - \theta(t' - t) \langle c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') c_{\mathbf{p}\sigma}(t) \rangle, \quad (4.44)$$

nous obtenons :

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_\sigma(\mathbf{p}, t - t') = \langle T \frac{\partial c_{\mathbf{p}\sigma}}{\partial t}(t) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') \rangle + \delta(t - t'). \quad (4.45)$$

L'évolution temporelle de l'opérateur $c_{\mathbf{p}\sigma}(t)$ est donnée par l'équation du mouvement :

$$i \frac{\partial c_{\mathbf{p}\sigma}}{\partial t}(t) = [c_{\mathbf{p}\sigma}(t), H'] = [c_{\mathbf{p}\sigma}(t), H'(t)], \quad (4.46)$$

où nous avons utilisé, dans la dernière égalité, le fait que H' coïncide avec son expression en représentation de Heisenberg $H'(t) = e^{iH't} H' e^{-iH't}$. Nous devons donc calculer la valeur moyenne $\langle T [c_{\mathbf{p}\sigma}(t), H'(t)] c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') \rangle$ avec $H'(t) = H'_0(t) + H_{\text{int}}(t)$. En utilisant l'expression de l'opérateur d'énergie cinétique donnée par l'équation (4.6), nous trouvons :

$$[c_{\mathbf{p}\sigma}(t), H'_0(t)] c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') = (\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma) c_{\mathbf{p}\sigma}(t) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t'). \quad (4.47)$$

Pour une interaction à deux corps, l'opérateur H_{int} s'écrit à l'aide des opérateurs champs :

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_\sigma(\mathbf{r}), \quad (4.48)$$

où le potentiel d'interaction est symétrique sous l'échange de deux particules : $V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V_{\sigma\sigma'}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = V_{\sigma'\sigma}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. L'expression des opérateurs champs en fonction des $c_{\mathbf{p}\sigma}$ (cf. équation (4.4)) montre que la représentation de Heisenberg de H_{int} est donnée par :

$$H_{\text{int}}(t) = \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} V_{\sigma\sigma', \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3} c_{\mathbf{p}_1\sigma}^\dagger(t^+) c_{\mathbf{p}_2\sigma'}^\dagger(t^+) c_{\mathbf{p}_4\sigma'}(t) c_{\mathbf{p}_3\sigma}(t), \quad (4.49)$$

où la prescription t^+ indique que les opérateurs de création c^\dagger interviennent après les opérateurs de destruction c . Nous avons également introduit la transformée de Fourier de $V_{\sigma\sigma'}$:

$$V_{\sigma\sigma', \mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}). \quad (4.50)$$

Les relations d'anticommutation à temps égaux montrent alors facilement que :

$$[c_{\mathbf{p}\sigma}(t), H_{\text{int}}(t)] c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \sigma'} V_{\sigma\sigma', \mathbf{p}-\mathbf{p}_2} c_{\mathbf{p}_1\sigma'}^\dagger(t^+) c_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2\sigma'}(t) c_{\mathbf{p}_2\sigma}(t) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t'). \quad (4.51)$$

Le calcul de la valeur moyenne fait donc intervenir la fonction de Green à deux particules. Plus précisément, en regroupant les équations (4.45), (4.47) et (4.51), nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + \mu_\sigma \right) G_\sigma(\mathbf{p}, t - t') \\ &= \delta(t - t') - \frac{i}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \sigma'} V_{\sigma\sigma', \mathbf{p}-\mathbf{p}_2} G_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_2 t, \mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 t; \mathbf{p} t', \mathbf{p}_1 t^+). \end{aligned} \quad (4.52)$$

Cette équation est l'équation dynamique reliant G et G^{II} . Par la même méthode, il est possible d'établir une série d'équations analogues reliant G et G^{II} aux fonctions de Green à 3, 4, ... particules, cette série d'équations étant équivalente à la résolution du problème à N -corps.

L'équation (4.52) s'écrit plus simplement en prenant sa transformée de Fourier. Comme G^{II} est invariant par translation simultanée des quatre variables de temps, sa représentation de Fourier comporte un facteur $\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4)$. Nous la définissons donc de la même manière que pour la fonction de Green à une particule, en isolant ce terme singulier :

$$G_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_i, t_i) = \int \frac{d\omega_i}{2\pi} (2\pi) \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) e^{-i(\omega_1 t_1 + \omega_2 t_2 - \omega_3 t_3 - \omega_4 t_4)} G_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(p_1 p_2, p_3 p_4), \quad (4.53)$$

où nous avons noté p_i le quadrivecteur $p_i = (\mathbf{p}_i, \omega_i)$ et supposé implicitement $p_1 + p_2 = p_3 + p_4$. Nous obtenons alors :

$$G_{0\sigma}^{-1}(p) G_\sigma(p) = 1 - \frac{i}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \sigma'} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} e^{i\omega_1 0^+} V_{\sigma\sigma', \mathbf{p}-\mathbf{p}_2} G_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(p_2, p + p_1 - p_2; p, p_1), \quad (4.54)$$

où nous avons utilisé la fonction de Green libre $G_{0\sigma}^{-1}(p) = [\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + \mu_\sigma]$. Nous montrerons dans la prochaine section que cette équation est exactement l'équation de Dyson dont nous donnerons une dérivation diagrammatique.

4.1.5 Fonctions de Green à température finie

Nous généralisons maintenant la notion de fonction de Green à un système de température finie (i.e. $T \neq 0$). Bien que le système qui nous intéresse ait une température nulle, c'est ce formalisme que nous utiliserons par la suite. En effet, celui-ci apparaîtra plus adapté à notre situation. Nous montrons donc également ici comment obtenir la fonction de Green à température nulle à partir de son expression à température finie.

• **Définitions.** — Il serait a priori naturel de généraliser la définition (4.5) en remplaçant la valeur moyenne sur l'état fondamental par la moyenne statistique :

$$\frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta H'} T c_{\mathbf{p}\sigma}(t) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta H'} \right]}, \quad (4.55)$$

avec $\beta = 1/T$. Cependant, les propriétés analytiques de la fonction de Green ainsi définie sont plus complexes que celles décrites précédemment lorsque $T = 0$. Ainsi, il est souvent plus simple de travailler en temps imaginaire, c'est le formalisme de Matsubara. Plus précisément, nous définissons la représentation de Matsubara d'un opérateur O par :

$$O(\tau) = e^{H'\tau} O e^{-H'\tau}, \quad \tau \in [0, \beta]. \quad (4.56)$$

Il est important de noter que dans cette représentation les opérateurs $O(\tau)$ et $O^\dagger(\tau)$ ne sont plus hermitiques l'un de l'autre, nous avons : $O(\tau)^\dagger = O^\dagger(-\tau) \neq O^\dagger(\tau)$. La fonction de Green à la température T est alors définie par :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau - \tau') = -\langle T c_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau') \rangle, \quad (4.57)$$

où nous avons noté $\langle \dots \rangle = \text{Tr}[e^{-\beta H'} \dots] / \text{Tr}[e^{-\beta H'}]$ la moyenne statistique. À nouveau, lorsque l'Hamiltonien est indépendant du temps, la fonction de Green est une fonction de la différence des temps $\tau - \tau'$, $\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau)$ est donc définie sur l'intervalle $[-\beta, \beta]$.

De la même manière, nous généralisons la définition de la fonction de Green à deux particules en posant :

$$\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_1\tau_1, \mathbf{p}_2\tau_2; \mathbf{p}_3\tau_3, \mathbf{p}_4\tau_4) = i\langle T c_{\mathbf{p}_1\sigma}(\tau_1) c_{\mathbf{p}_2\sigma'}(\tau_2) c_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger(\tau_3) c_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger(\tau_4) \rangle. \quad (4.58)$$

Le facteur i est parfois omis, la fonction de Green à deux particules est alors réelle. Nous le rajoutons ici pour retrouver la fonction de Green G^{II} dans la limite de température nulle.

• **Propriétés, fréquences de Matsubara.** — L'invariance par permutation circulaire de la trace montre facilement que la fonction de Green \mathcal{G}_σ vérifie la propriété d'antipériodicité :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau) = -\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau + \beta), \quad \text{si } \tau \in [-\beta, 0]. \quad (4.59)$$

Elle admet donc une représentation en série de Fourier de la forme :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n\tau} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n), \quad \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau), \quad (4.60)$$

où les ω_n sont les fréquences de Matsubara fermioniques vérifiant $e^{i\omega_n\beta} = -1$:

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (4.61)$$

De la même manière, nous pouvons prolonger la fonction de Green à deux particules

pour $\tau_i \in [-\beta, 0]$ en posant :

$$\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_1\tau_1, \mathbf{p}_2\tau_2; \mathbf{p}_3\tau_3, \mathbf{p}_4\tau_4) = -\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_1\tau_1 + \beta, \mathbf{p}_2\tau_2; \mathbf{p}_3\tau_3, \mathbf{p}_4\tau_4), \quad \text{si } \tau_1 \in [-\beta, 0], \quad (4.62)$$

et définir sa représentation de Fourier à l'aide :

$$\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_i, \tau_i) = \frac{1}{\beta^4} \sum_{\omega_{ni}} \beta \delta_{\omega_{n1} + \omega_{n2}, \omega_{n3} + \omega_{n4}} e^{-i(\omega_{n1}\tau_1 + \omega_{n2}\tau_2 - \omega_{n3}\tau_3 - \omega_{n4}\tau_4)} \mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_i, i\omega_{ni}). \quad (4.63)$$

À nouveau, comme dans l'équation (4.53), nous avons isolé le terme en δ qui provient de l'invariance par translation temporelle et supposé implicitement $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$ et $\omega_{n1} + \omega_{n2} = \omega_{n3} + \omega_{n4}$ dans la fonction de Green $\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_i, i\omega_{ni})$.

Comme dans la situation à $T = 0$, la fonction de Green décrit de nombreuses propriétés thermodynamiques du système. Citons par exemple la population moyenne de l'onde plane de vecteur d'onde \mathbf{p} :

$$n_{\sigma\mathbf{p}} \equiv \langle c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma} \rangle = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} G_\sigma(\mathbf{p}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n 0^+} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n), \quad (4.64)$$

qui fournit également le nombre moyen de particules $N_\sigma = \sum_{\mathbf{p}} n_{\sigma\mathbf{p}}$.

• **Particules sans interaction.** — Pour illustrer les définitions et propriétés précédentes, calculons maintenant la fonction de Green $\mathcal{G}_{0\sigma}$ d'un système de particules sans interaction dont l'Hamiltonien H'_0 est donné par l'équation (4.6). La représentation de Matsubara de l'opérateur $c_{\mathbf{p}\sigma}$ est alors :

$$c_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) = e^{-(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)\tau} c_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (4.65)$$

En utilisant la définition (4.69), nous obtenons pour $\tau > 0$:

$$\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, \tau) = -e^{-(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)\tau} \langle c_{\mathbf{p}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \rangle = -e^{-(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)\tau} (1 - n_{\sigma\mathbf{p}}), \quad (4.66)$$

où le nombre d'occupation est donné par la distribution de Fermi-Dirac :

$$n_{\sigma\mathbf{p}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)} + 1}. \quad (4.67)$$

Pour $\tau < 0$, nous pouvons utiliser la relation (4.59) :

$$\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, \tau) = -\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, \tau + \beta) = e^{-(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)\tau} n_{\sigma\mathbf{p}}. \quad (4.68)$$

Enfin, les coefficients de Fourier sont obtenus à l'aide de la définition (4.60) :

$$\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + \mu_\sigma}. \quad (4.69)$$

Cette dernière expression ne dépend de la température que par la fréquence de Matsubara ω_n . Remarquons également que nous pouvons l'exprimer à l'aide de la fonction de Green

à $T = 0$ calculée précédemment en remplaçant simplement ω par $i\omega_n$: $\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n) = G_{0\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n)$. Nous établirons plus loin un résultat analogue pour la fonction de Green exacte, mais nous avons besoin, pour cela, d'introduire auparavant la représentation spectrale de \mathcal{G}_σ .

• **Représentation spectrale.** — Pour $\tau > 0$, la fonction de Green s'écrit $\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau) = -\text{Tr}[e^{-\beta H'} c_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(0)]/Z$ où $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H'}]$ est la fonction de partition grand-canonique. Contrairement au cas de la température nulle où seules les transitions entre l'état fondamental et un état excité contribuaient, la fonction de Green fait intervenir maintenant tous les éléments de matrice entre deux états excités. Plus précisément, en notant $|a\rangle$ la famille des états propres du système $H'|a\rangle = E'_a|a\rangle$, et en introduisant une relation de fermeture $\sum_b |b\rangle\langle b| = \mathbb{1}$, nous obtenons :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau) = -\frac{1}{Z} \sum_a e^{(\tau-\beta)E'_a} \langle a|c_{\mathbf{p}\sigma} e^{-H'\tau} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger|a\rangle = -\frac{1}{Z} \sum_{a,b} e^{\tau(E'_a-E'_b)-\beta E'_a} \left| \langle b|c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger|a\rangle \right|^2. \quad (4.70)$$

Les coefficients de Fourier s'expriment alors sous la forme :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{a,b} \frac{e^{-\beta E'_a} + e^{-\beta E'_b}}{i\omega_n + E'_a - E'_b} \left| \langle b|c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger|a\rangle \right|^2. \quad (4.71)$$

Nous pouvons maintenant introduire la densité spectrale du système :

$$\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{a,b} \left(e^{-\beta E'_a} + e^{-\beta E'_b} \right) \left| \langle b|c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger|a\rangle \right|^2 \delta(\omega + E'_a - E'_b). \quad (4.72)$$

Comme précédemment, cette fonction est réelle, positive et normalisée $\int d\omega \mathcal{A}_\sigma(\mathbf{p}, \omega) = 1$. L'équation (4.71) s'écrit alors simplement :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{p}, \omega')}{i\omega_n - \omega'}. \quad (4.73)$$

Cette dernière expression nous permet d'étendre naturellement la fonction de Green au plan complexe des fréquences à l'exception de l'axe réel :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{p}, \omega')}{\omega - \omega'}, \quad \omega \notin \mathbb{R}. \quad (4.74)$$

Pour ω réelle, il y a, comme dans le cas de la température nulle, plusieurs prolongements possibles (correspondant à G , G_A ou G_R). Par analogie avec la fonction de Green G (cf. équation (4.30)), nous posons :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \omega) = \begin{cases} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \omega + i0^+) & \text{si } \omega > 0 \\ \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \omega - i0^+) & \text{si } \omega < 0 \end{cases}, \quad \omega \in \mathbb{R}. \quad (4.75)$$

La fonction ainsi définie est analytique dans les deux demi-plans $\text{Im } \omega > 0$ et $\text{Im } \omega < 0$ et vérifie :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \omega) \sim \frac{1}{\omega}, \quad \text{pour } |\omega| \rightarrow \infty. \quad (4.76)$$

Plus précisément, par unicité du prolongement analytique, $\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \omega)$ est la fonction analytique dans ces deux demi-plans prenant les valeurs $\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$ en $i\omega_n$ et vérifiant la condition (4.76). En pratique, la détermination de ce prolongement est parfois difficile, il peut être obtenu numériquement à l'aide des approximants de Padé.

Enfin, indiquons que le nombre d'occupation $n_{\sigma\mathbf{p}}$ peut être obtenu à partir de la densité spectrale à l'aide de la relation :

$$n_{\sigma\mathbf{p}} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) A_\sigma(\mathbf{p}, \omega), \quad \text{avec } f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1}, \quad (4.77)$$

qui est l'analogie, pour $T \neq 0$, de la dernière égalité de (4.40).

• **Limite $T \rightarrow 0$.** — Intéressons-nous maintenant à la limite de température nulle ($\beta \rightarrow \infty$) de la fonction de Green \mathcal{G}_σ et de la densité spectrale \mathcal{A}_σ . Nous supposons pour cela que l'état fondamental du système n'est pas dégénéré, son énergie E'_0 est la plus petite des valeurs E'_a . La fonction de partition grand-canonique s'écrit $Z = \sum_a e^{-\beta E'_a}$ et son comportement pour $\beta \rightarrow \infty$ est dominé par E'_0 : $Z \simeq e^{-\beta E'_0}$. De la même manière, dans l'expression de \mathcal{A}_σ donnée par l'équation (4.72), le terme dominant est obtenu lorsque $E'_a = E'_0$ ou $E'_b = E'_0$ et nous avons alors $e^{-\beta E'_a} + e^{-\beta E'_b} \simeq e^{-\beta E'_0}$. Ainsi, nous obtenons :

$$\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{p}, \omega) \approx \sum_b \left| \langle b | c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2 \delta(\omega + E'_0 - E'_b) + \sum_a \left| \langle a | c_{\mathbf{p}\sigma} | \Psi_0 \rangle \right|^2 \delta(\omega + E'_a - E'_0). \quad (4.78)$$

Cette dernière expression est identique à la définition (4.19) de la densité spectrale à température nulle, nous avons donc :

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{A}_\sigma(\mathbf{p}, \omega) = A_\sigma(\mathbf{p}, \omega). \quad (4.79)$$

Enfin, en comparant la limite $T \rightarrow 0$ de l'équation (4.74) avec l'équation (4.21), nous obtenons la relation importante :

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \omega) = G_\sigma(\mathbf{p}, \omega), \quad \omega \in \mathbb{C}. \quad (4.80)$$

Ainsi, pour obtenir G_σ , nous pouvons simplement calculer la fonction de Green \mathcal{G}_σ dans la limite de température nulle. Notons que, pour $T \rightarrow 0$, les fréquences discrètes de Matsubara se rapprochent les unes des autres, et la fonction $\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \omega)$ est naturellement définie sur l'ensemble de l'axe imaginaire des fréquences. Nous obtenons alors sa valeur sur l'axe réel des fréquences à l'aide du prolongement analytique défini précédemment.

De la même manière, nous pouvons montrer un résultat analogue pour la fonction de Green à deux particules :

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_i, \omega_i) = G_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_i, \omega_i), \quad \omega_i \in \mathbb{C}. \quad (4.81)$$

4.2 Développement diagrammatique

Jusqu'à présent, nous nous sommes limités à une étude formelle des fonctions de Green et nous n'avons aucun moyen pour les calculer dans le cas général. Nous présentons maintenant une méthode basée sur un développement en série par rapport à la force de l'interaction entre particules. La validité mathématique de ce procédé est discutable, la convergence de la série obtenue étant invérifiable en pratique. Naturellement, pour que ce développement ait un sens, les propriétés du système doivent varier de façon continue lorsque le couplage entre particules croît de zéro à sa valeur réelle. La structure de l'état de base ne peut donc pas changer de manière significative ; nous nous limiterons ici aux systèmes normaux dont la surface de Fermi est peu modifiée par rapport au gaz sans interaction.

Ce développement diagrammatique peut être effectué à température nulle ou à température finie. Bien que ce soit la fonction de Green à température nulle qui nous intéresse, nous présentons ici le formalisme à température finie. En effet, c'est celui-ci qui est le plus adapté à notre problème et que nous utiliserons en pratique.

4.2.1 Représentation d'interaction

Écrivons l'Hamiltonien du système sous la forme $H' = H'_0 + H_{\text{int}}$ où H'_0 est l'Hamiltonien sans interaction (cf. équation (4.6)). Les représentations d'Heisenberg ou de Matsubara traitent H'_0 et H_{int} de la même manière, alors que les états propres de H'_0 sont connus. C'est pourquoi, nous introduisons une nouvelle représentation en temps imaginaire appelée représentation d'interaction et définie par :

$$\hat{O}(\tau) = e^{H'_0\tau} O e^{-H'_0\tau}, \quad \tau \in [0, \beta]. \quad (4.82)$$

Comme pour la représentation de Matsubara, les opérateurs $\hat{O}(\tau)$ et $\hat{O}^\dagger(\tau)$ ne sont pas hermitiques l'un de l'autre, $\hat{O}(\tau)^\dagger = \hat{O}^\dagger(-\tau) \neq \hat{O}^\dagger(\tau)$. Dans cette représentation, nous avons $\hat{H}'_0(\tau) = H'_0$ et $\hat{N}(\tau) = \hat{N}$. L'expression de $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau)$ est donnée par l'équation (4.65) :

$$\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) = e^{-(\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma)\tau} c_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (4.83)$$

Lorsque $H' = H'_0$, la représentation de Matsubara et la représentation d'interaction coïncident. Dans le cas général, la représentation de Matsubara d'un opérateur O s'obtient à partir de sa représentation d'interaction et de l'opérateur $U(\tau) = e^{H'_0\tau} e^{-H\tau}$:

$$O(\tau) = U^{-1}(\tau) \hat{O}(\tau) U(\tau). \quad (4.84)$$

L'opérateur $U(\tau)$ vérifie l'équation différentielle :

$$\frac{dU(\tau)}{d\tau} = -\hat{H}_{\text{int}}(\tau)U(\tau), \quad (4.85)$$

avec la condition initiale $U(0) = \mathbb{1}$. En utilisant le caractère bosonique de l'opérateur \hat{H}_{int} qui implique notamment $T\hat{H}_{\text{int}}(\tau)\hat{H}_{\text{int}}(\tau') = T\hat{H}_{\text{int}}(\tau')\hat{H}_{\text{int}}(\tau)$, nous pouvons facilement

vérifier que la solution de cette équation est donnée par [AGD76] :

$$U(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\tau d\tau_1 \cdots \int_0^\tau d\tau_n T \hat{H}_{\text{int}}(\tau_1) \cdots \hat{H}_{\text{int}}(\tau_n) \equiv T \exp \left(- \int_0^\tau d\tau' \hat{H}_{\text{int}}(\tau') \right), \quad (4.86)$$

qui est un développement en puissances de l'interaction.

En utilisant l'équation (4.84) et la définition (4.57) de la fonction de Green nous obtenons :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, \tau - \tau') &= - \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta H'_0} U(\beta) T U^{-1}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) U(\tau) U^{-1}(\tau') \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau') U(\tau') \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta H'_0} U(\beta) \right]} \\ &= - \frac{\langle T \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}, \end{aligned} \quad (4.87)$$

où nous avons utilisé le caractère bosonique de U et noté $\langle \cdots \rangle_0 = \text{Tr}[e^{-\beta H'_0} \cdots] / \text{Tr}[e^{-\beta H'_0}]$ la moyenne statistique pour un système sans interaction.

De la même manière, la fonction de Green à deux particules s'écrit :

$$\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_1\tau_1, \mathbf{p}_2\tau_2; \mathbf{p}_3\tau_3, \mathbf{p}_4\tau_4) = i \frac{\langle T \hat{c}_{\mathbf{p}_1\sigma}(\tau_1) \hat{c}_{\mathbf{p}_2\sigma'}(\tau_2) \hat{c}_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger(\tau_3) \hat{c}_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger(\tau_4) U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}. \quad (4.88)$$

4.2.2 Théorème de Wick

Comme nous l'avons déjà vu, l'Hamiltonien d'interaction $\hat{H}_{\text{int}}(\tau)$ fait intervenir de manière générale le produit d'un certain nombre d'opérateurs $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau)$ et $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau)$. Pour une interaction à deux corps, il est par exemple donné par une expression analogue à l'équation (4.49) :

$$\hat{H}_{\text{int}}(\tau) = \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4} V_{\sigma\sigma', \mathbf{p}_1-\mathbf{p}_3} \hat{c}_{\mathbf{p}_1\sigma}^\dagger(\tau^+) \hat{c}_{\mathbf{p}_2\sigma'}^\dagger(\tau^+) \hat{c}_{\mathbf{p}_4\sigma'}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}_3\sigma}(\tau). \quad (4.89)$$

Ainsi, les équations (4.87) et (4.88) et le développement perturbatif de $U(\beta)$ donné par (4.86) montrent que le calcul des fonctions de Green se ramène à l'évaluation des valeurs moyennes, pour un système sans interaction, de produits ordonnés d'opérateurs $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau)$ et $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau)$. Le théorème de Wick permet alors d'exprimer ces valeurs moyennes à l'aide des valeurs moyennes de deux opérateurs seulement. Nous renvoyons à l'annexe A.3 pour sa formulation dans le cas général et à [FW71] pour sa démonstration. Nous l'illustrons ici simplement sur un exemple qui nous sera utile par la suite. Pour calculer la valeur moyenne :

$$\langle T \hat{c}_{\mathbf{p}_\downarrow}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}_\downarrow}^\dagger(\tau') \hat{c}_{\mathbf{p}_1\downarrow}^\dagger(\tau_1^+) \hat{c}_{\mathbf{p}_2\uparrow}^\dagger(\tau_1^+) \hat{c}_{\mathbf{p}_4\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{\mathbf{p}_3\downarrow}(\tau_1) \rangle_0, \quad (4.90)$$

nous devons effectuer toutes les contractions possibles d'opérateurs $\hat{c}_{\mathbf{p}_i\sigma}(\tau_i)$ avec $\hat{c}_{\mathbf{p}_j\sigma}^\dagger(\tau_j)$ et leur associer une fonction de Green libre :

$$\underbrace{\hat{c}_{\mathbf{p}_i\sigma}(\tau_i)\hat{c}_{\mathbf{p}_j\sigma}^\dagger(\tau_j)} = -\delta_{\mathbf{p}_i,\mathbf{p}_j}\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}_i,\tau_i-\tau_j). \quad (4.91)$$

Les deux seules possibilités sont celles indiquées au-dessus et au-dessous de l'équation (4.90). Elles correspondent à :

$$\begin{aligned} & + \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}_1}\mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p},\tau-\tau_1)\delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}_3}\mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p},\tau_1-\tau')\delta_{\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_4}\mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2,0^-) \\ & - \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p},\tau-\tau')\delta_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_3}\mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}_1,0^-)\delta_{\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_4}\mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2,0^-), \end{aligned} \quad (4.92)$$

où le signe supplémentaire est obtenu à partir de la signature de la permutation permettant de ramener les opérateurs en contraction côte à côte (cf. annexe A.3).

4.2.3 Diagrammes de Feynman

Nous pouvons désormais calculer la fonction de Green donnée par l'équation (4.87) en utilisant le développement perturbatif de $U(\beta)$. Le calcul des premiers termes va nous permettre d'obtenir les règles de Feynman qui associent à chaque diagramme une expression analytique. Nous nous limiterons désormais à un Hamiltonien d'interaction couplant uniquement les fermions de spin opposé et que nous avons déjà utilisé dans le chapitre 2, $V_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma,-\sigma'}V$. La représentation de Matsubara de H_{int} est alors donnée par :

$$\hat{H}_{\text{int}}(\tau) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_i} \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4} V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_3} \hat{c}_{\mathbf{p}_1\downarrow}^\dagger(\tau^+) \hat{c}_{\mathbf{p}_2\uparrow}^\dagger(\tau^+) \hat{c}_{\mathbf{p}_4\uparrow}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}_3\downarrow}(\tau). \quad (4.93)$$

Par symétrie de \hat{H}_{int} sous l'échange $\uparrow \leftrightarrow \downarrow$, nous ne considérerons ici que la fonction de Green du fermion \downarrow , celle du \uparrow pouvant s'en déduire immédiatement par échange de tous les spins. En utilisant le développement de $U(\beta)$ à l'ordre 0 dans le numérateur de l'expression donnant \mathcal{G}_\downarrow (cf. équation (4.87)), nous obtenons simplement la fonction de Green libre $\mathcal{G}_{0\downarrow}$. Le terme d'ordre 1 donne :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{G}_\downarrow^{(1)} &= \frac{1}{\langle U(\beta) \rangle_0 \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_i} \int_0^\beta d\tau_1 \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4} V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_3} \\ & \quad \times \langle T \hat{c}_{\mathbf{p}_1\downarrow}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}_4\downarrow}^\dagger(\tau') \hat{c}_{\mathbf{p}_1\downarrow}^\dagger(\tau_1^+) \hat{c}_{\mathbf{p}_2\uparrow}^\dagger(\tau_1^+) \hat{c}_{\mathbf{p}_4\uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{\mathbf{p}_3\downarrow}(\tau_1) \rangle_0. \end{aligned} \quad (4.94)$$

La valeur moyenne sous l'intégrale est celle que nous avons considérée dans l'équation (4.90). En utilisant le résultat (4.92), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{G}_\downarrow^{(1)} &= \frac{1}{\langle U(\beta) \rangle_0 \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_2} \int_0^\beta d\tau_1 V_0 \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p},\tau-\tau_1) \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p},\tau_1-\tau') \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2,0^-) \\ & \quad - \frac{1}{\langle U(\beta) \rangle_0 \mathcal{V}} \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p},\tau-\tau') \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} \int_0^\beta d\tau_1 V_0 \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}_1,0^-) \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2,0^-). \end{aligned} \quad (4.95)$$

Nous pouvons maintenant associer à chacun de ces deux termes un des diagrammes de la figure 4.2, le premier terme correspondant au diagramme (a) et le deuxième au dia-

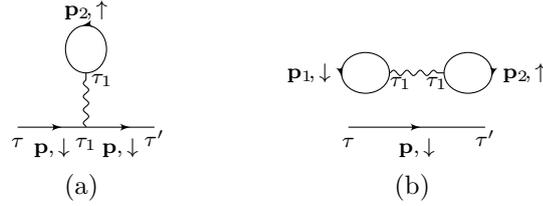


FIG. 4.2: Diagrammes d'ordre 1 contribuant au numérateur de $\mathcal{G}_\downarrow(\mathbf{p}, \tau - \tau')$.

gramme (b). La fonction de Green $\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, \tau - \tau')$ est représentée par une flèche portant l'impulsion \mathbf{p} et le spin σ allant des instants τ à τ' , alors que l'interaction entre fermions est représentée par une ligne ondulée entre deux instants égaux (l'interaction est instantanée pour notre Hamiltonien). Ces dessins sont appelés diagrammes de Feynman, ils ont été introduits pour la première fois par Feynman au cours de ses travaux en électrodynamique quantique. De manière générale, pour obtenir la correction à l'ordre n de la fonction de Green, nous devons dessiner tous les diagrammes de Feynman avec n lignes d'interaction et calculer les intégrales correspondantes.

- **Élimination des diagrammes non connexes.** — Les diagrammes de Feynman intervenant dans la fonction de Green \mathcal{G}_\downarrow peuvent être divisés en deux groupes : les diagrammes connexes et les diagrammes non connexes. Par exemple le diagramme (a) de la figure 4.2 est connexe alors que le diagramme (b) ne l'est pas. Il est alors possible de montrer que les diagrammes non connexes sont exactement compensés par le facteur $\langle U(\beta) \rangle_0$ du dénominateur de \mathcal{G}_\downarrow (cf. équation (4.87)). De plus, lorsqu'on effectue les contractions, plusieurs diagrammes donnent en fait la même contribution. Ces diagrammes équivalents compensent exactement le facteur $1/n!$ présent dans le développement perturbatif (4.86). Ainsi, pour évaluer la fonction de Green à l'ordre n , nous devons dessiner tous les diagrammes connexes non topologiquement équivalents et calculer l'expression correspondante en omettant les facteurs $\langle U(\beta) \rangle_0$ dans l'équation (4.87) et $1/n!$ dans l'équation (4.86). Nous renvoyons à [AGD76] et à l'annexe A.4 pour une justification détaillée de ce résultat.

- **Représentation de Fourier, règles de Feynman.** — Nous avons utilisé jusqu'à maintenant le formalisme dépendant du temps qui s'introduit naturellement dans le cadre de la représentation d'interaction. Nous pouvons désormais obtenir des expressions plus compactes en effectuant une transformation de Fourier. Par exemple, la contribution à l'ordre 1 :

$$\delta\mathcal{G}_\downarrow^{(1)}(\mathbf{p}, \tau - \tau') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_2} \int_0^\beta d\tau_1 V_0 \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau - \tau_1) \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau_1 - \tau') \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, 0^-), \quad (4.96)$$

devient :

$$\delta\mathcal{G}_\downarrow^{(1)}(\mathbf{p}, i\omega_n) = \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, i\omega_n)^2 \frac{1}{\beta\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_2, \omega_{n_2}} V_0 e^{i\omega_{n_2} 0^+} \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, i\omega_{n_2}), \quad (4.97)$$

et le diagramme correspondant est représenté sur la figure 4.3. Ce diagramme est appelé terme de Hartree. C'est l'unique diagramme d'ordre 1, le terme de Fock étant ici nul

puisqu'il fait intervenir une interaction entre deux particules de même spin.

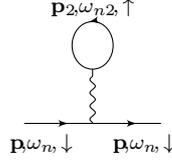


FIG. 4.3: Le diagramme d'ordre 1 contribuant à $\mathcal{G}_{\downarrow}(\mathbf{p}, i\omega_n)$.

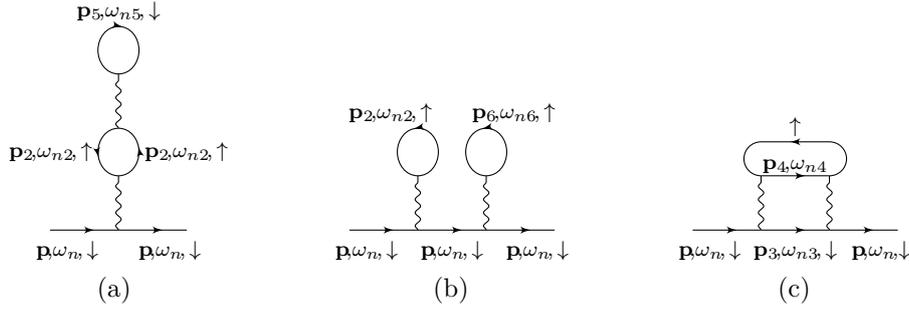
De manière générale, un diagramme d'ordre k contribuant à $\mathcal{G}_{\downarrow}(\mathbf{p}, i\omega_n)$ possède $2k$ nœuds reliés par k lignes ondulées d'interaction (auxquelles on attribue k variables d'impulsion et de fréquence), $k+1$ propagateurs $\mathcal{G}_{0\downarrow}$ et k propagateurs $\mathcal{G}_{0\uparrow}$. Il y a donc au total $3k+1$ impulsions et fréquences. Les deux lignes externes de propagateurs $\mathcal{G}_{0\downarrow}$ portent l'impulsion \mathbf{p} et la fréquence ω_n . Les $3k-1$ impulsions et fréquences des lignes internes sont contraintes par $2k-1$ relations de conservation indépendantes aux nœuds du diagramme (car une relation correspondant à la conservation globale de l'impulsion et de la fréquence est déjà assurée). Il reste donc k sommes sur les impulsions et fréquences. Nous pouvons par exemple vérifier ces propriétés sur les diagrammes à l'ordre 2. En appliquant le théorème de Wick, nous obtenons trois diagrammes connexes, correspondant à :

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{G}_{\downarrow}^{(2)}(\mathbf{p}, \tau - \tau') = & \\
& + \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_5} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 V_0 V_0 \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau - \tau_1) \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau_1 - \tau') \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}_5, 0^-) \\
& \quad \times \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, \tau_2 - \tau_1) \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, \tau_1 - \tau_2) \\
& + \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_6} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 V_0 V_0 \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau - \tau_1) \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau_1 - \tau_2) \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau_2 - \tau') \\
& \quad \times \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, 0^-) \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_6, 0^-) \\
& - \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{p}_3\mathbf{p}_4} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3} V_{\mathbf{p}_3-\mathbf{p}} \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau - \tau_1) \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}_3, \tau_1 - \tau_2) \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, \tau_2 - \tau') \\
& \quad \times \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_4, \tau_1 - \tau_2) \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_4 + \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}, \tau_2 - \tau_1).
\end{aligned} \tag{4.98}$$

En prenant la transformée de Fourier, cette expression devient :

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{G}_{\downarrow}^{(2)}(\mathbf{p}, i\omega_n) = & \\
& + \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, i\omega_n)^2 \frac{1}{(\beta\mathcal{V})^2} \sum_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_5, \omega_n_2\omega_n_5} e^{i\omega_n_5 0^+} V_0 V_0 \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}_5, i\omega_n_5) \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, i\omega_n_2)^2 \\
& + \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, i\omega_n)^2 \frac{1}{(\beta\mathcal{V})^2} \sum_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_6, \omega_n_2\omega_n_6} e^{i\omega_n_2 0^+} e^{i\omega_n_6 0^+} V_0 V_0 \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, i\omega_n) \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, i\omega_n_2) \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_6, i\omega_n_6) \\
& - \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}, i\omega_n)^2 \frac{1}{(\beta\mathcal{V})^2} \sum_{\mathbf{p}_3\mathbf{p}_4, \omega_n_3\omega_n_4} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3} V_{\mathbf{p}_3-\mathbf{p}} \mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}_3, i\omega_n_3) \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_4, i\omega_n_4) \\
& \quad \times \mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}_4 + \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}, i(\omega_n_4 + \omega_n_3 - \omega_n)),
\end{aligned} \tag{4.99}$$

et nous avons représenté les trois diagrammes correspondant sur la figure 4.4.

FIG. 4.4: Les diagrammes d'ordre 2 contribuant à $\mathcal{G}_\downarrow(\mathbf{p}, i\omega_n)$.

Les règles générales pour obtenir l'expression analytique associée à un diagramme donné d'ordre k sont les suivantes :

1. Attribuer à chaque ligne du diagramme une impulsion et une fréquence, de telle sorte que les deux lignes externes portent l'impulsion \mathbf{p} et la fréquence ω_n et qu'à chaque nœud du diagramme l'impulsion et la fréquence soient conservées ;
2. Sommer sur les k impulsions $1/\mathcal{V} \sum_{\mathbf{p}_i}$ et les k fréquences $1/\beta \sum_{\omega_{ni}}$ indépendantes en ajoutant le facteur de convergence $e^{i\omega_{ni}0^+}$ à chaque fois qu'un propagateur boucle sur lui-même ;
3. Associer à chaque ligne de propagateur interne (d'impulsion \mathbf{p}' et de fréquence ω'_n), le facteur $\mathcal{G}_{0\uparrow}(\mathbf{p}', i\omega'_n)$ ou $\mathcal{G}_{0\downarrow}(\mathbf{p}', i\omega'_n)$, et à chaque ligne ondulée (d'impulsion \mathbf{p}'), le facteur $V_{\mathbf{p}'}$;
4. Associer à chaque ligne de propagateur externe (d'impulsion \mathbf{p} et de fréquence ω_n), le facteur $\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n)$;
5. Multiplier par $(-1)^{k+F}$ où F est le nombre de boucles de fermions. Par exemple, les diagrammes 4.3 et 4.4-(c) ont une boucle de fermions, alors que les diagrammes 4.4-(a) et 4.4-(b) en ont deux.

Dans la limite $T \rightarrow 0$, $\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n)$ devient $G_{0\sigma}(\mathbf{p}, \omega)$ avec ω sur l'axe imaginaire des fréquences, les sommes sur les fréquences de Matsubara deviennent des intégrales sur l'axe imaginaire :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_{ni}} \cdots \rightarrow \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{d\omega_i}{2i\pi} \cdots, \quad (4.100)$$

et le facteur de convergence $e^{i\omega_{ni}0^+}$ devient $e^{\omega_i 0^+}$. Ce sont ces règles que nous utiliserons désormais. En particulier, sauf mention explicite du contraire, toutes les fréquences qui interviennent sont situées sur l'axe imaginaire et nous noterons parfois $p_i = (\mathbf{p}_i, \omega_i)$ le quadrivecteur et :

$$\sum_{p_i} \cdots \equiv \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{d\omega_i}{2i\pi} \cdots, \quad (4.101)$$

la somme correspondante.

4.2.4 Self-énergie, vertex, équation de Dyson

• **Self-énergie.** — Dans la plupart des situations, il n'est pas possible de se limiter aux seuls premiers termes de la série du développement perturbatif. En effet, plusieurs termes donnent en général des contributions du même ordre de grandeur et nous devons alors en sommer une infinité correspondant aux diagrammes les plus significatifs. Une des propriétés remarquables des techniques diagrammatiques est justement la possibilité de pouvoir resommer, au moins formellement, certains diagrammes ou parties de diagrammes. L'exemple le plus simple de resommation est le suivant : nous appelons self-énergie et notons $\Sigma_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$ la somme (sans les deux pattes externes) de tous les diagrammes irréductibles intervenant dans la fonction de Green $\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$. Un diagramme est dit irréductible s'il ne peut pas être séparé en deux parties disjointes en coupant exactement une ligne de propagateur libre. Par exemple, le diagramme 4.4-(b) est réductible alors que les diagrammes 4.3, 4.4-(a) et 4.4-(c) sont irréductibles. Il est alors

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \mathbf{p}\omega_n\sigma \end{array} + \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \mathbf{p}\omega_n\sigma \end{array} \circlearrowleft \Sigma_\sigma \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \mathbf{p}\omega_n\sigma \end{array} + \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \mathbf{p}\omega_n\sigma \end{array} \circlearrowleft \Sigma_\sigma \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \mathbf{p}\omega_n\sigma \end{array} \circlearrowleft \Sigma_\sigma \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \mathbf{p}\omega_n\sigma \end{array} + \dots$$

FIG. 4.5: Expression de la fonction de Green $\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$ à l'aide de la self-énergie $\Sigma_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$.

immédiat que tout diagramme de $\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$ peut être décomposé en une succession de diagrammes irréductibles et de propagateurs libres $\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n)$, ce que nous représentons graphiquement sur la figure 4.5. Cette décomposition correspond à l'équation :

$$\mathcal{G}_\sigma = \mathcal{G}_{0\sigma} + \mathcal{G}_{0\sigma}\Sigma_\sigma\mathcal{G}_{0\sigma} + \mathcal{G}_{0\sigma}\Sigma_\sigma\mathcal{G}_{0\sigma}\Sigma_\sigma\mathcal{G}_{0\sigma} + \dots, \quad (4.102)$$

qui peut aussi s'écrire :

$$\mathcal{G}_\sigma = \mathcal{G}_{0\sigma} + \mathcal{G}_{0\sigma}\Sigma_\sigma\mathcal{G}_\sigma. \quad (4.103)$$

Ainsi, en prenant la limite $T \rightarrow 0$ et en utilisant l'expression du propagateur libre (cf. équation (4.69)), nous obtenons :

$$G_\sigma(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + \mu_\sigma - \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \omega)}, \quad (4.104)$$

Cette relation est valable pour ω sur l'axe imaginaire, nous l'étendons ensuite à l'ensemble du plan complexe des fréquences. Elle peut également s'écrire :

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \omega) = \omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + \mu_\sigma - G_\sigma^{-1}(\mathbf{p}, \omega). \quad (4.105)$$

Or, nous avons vu que les zéros et les singularités de G_σ sont situés sur l'axe réel des fréquences, donc Σ_σ est analytique en dehors de l'axe réel. De plus, en utilisant l'équation (4.25), nous voyons que pour ω réelle $\text{Im} \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \omega)$ est du signe de $-\omega$. La continuité de Σ_σ implique donc que $\text{Im} \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, 0) = 0$. Plus précisément, Luttinger a montré que [Lut61] :

$$\text{Im} \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \omega) \sim C_{\mathbf{p}}\omega^2, \quad \text{pour } \omega \rightarrow 0, \quad (4.106)$$

avec $C_{\mathbf{p}} < 0$ si $\omega > 0$ et $C_{\mathbf{p}} > 0$ si $\omega < 0$. Enfin, d'après la section précédente, pour obtenir l'énergie de la quasi-particule, nous devons déterminer le pôle $\xi_{\mathbf{p}} \mp i\Gamma_{\mathbf{p}}$ des prolongements analytiques de G , le signe $-$ correspondant à un pôle de G_R pour $\xi_{\mathbf{p}} > 0$ et le signe $+$ à un pôle de G_A pour $\xi_{\mathbf{p}} < 0$. D'après l'équation (4.104), en identifiant partie réelle et partie imaginaire, nous obtenons :

$$\begin{cases} \xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{p}) - \mu_{\sigma} + \text{Re} \Sigma_{\sigma}^{R,A}(\mathbf{p}, \xi_{\mathbf{p}} \mp i\Gamma_{\mathbf{p}}) \\ \Gamma_{\mathbf{p}} = \mp \text{Im} \Sigma_{\sigma}^{R,A}(\mathbf{p}, \xi_{\mathbf{p}} \mp i\Gamma_{\mathbf{p}}) \end{cases}, \quad (4.107)$$

où Σ^R et Σ^A sont définies par des relations analogues à (4.105) en remplaçant G par G_R et G_A . Or, au voisinage de la surface de Fermi, $\xi_{\mathbf{p}} \rightarrow 0$. Nous déduisons alors de la deuxième équation et de (4.106) que $\Gamma_{\mathbf{p}}$ est négligeable devant $\xi_{\mathbf{p}}$. L'énergie de la quasi-particule est donc solution de l'équation :

$$\xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{p}) - \mu_{\sigma} + \text{Re} \Sigma_{\sigma}(\mathbf{p}, \xi_{\mathbf{p}}). \quad (4.108)$$

De la même manière, nous obtenons le résidu de quasi-particule :

$$z_{\mathbf{p}} = \left[1 - \frac{\partial \text{Re} \Sigma_{\sigma}}{\partial \omega}(\mathbf{p}, \xi_{\mathbf{p}}) \right]^{-1}. \quad (4.109)$$

• **Fonction de Green à deux particules.** — Revenons momentanément à la forme générale de l'Hamiltonien d'interaction donnée par l'équation (4.89). Nous pouvons alors écrire l'intégrale intervenant dans le développement perturbatif (4.86) sous la forme symétrique :

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta} d\tau \hat{H}_{\text{int}}(\tau) &= \frac{1}{4\mathcal{V}} \int_0^{\beta} d\tau_i \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma_i} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} \\ &\times \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2, \sigma_3 \sigma_4}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \tau_1, \mathbf{p}_2 \tau_2; \mathbf{p}_3 \tau_3, \mathbf{p}_4 \tau_4) \hat{c}_{\mathbf{p}_1 \sigma_1}^{\dagger}(\tau_1) \hat{c}_{\mathbf{p}_2 \sigma_2}^{\dagger}(\tau_2) \hat{c}_{\mathbf{p}_4 \sigma_4}(\tau_4) \hat{c}_{\mathbf{p}_3 \sigma_3}(\tau_3), \end{aligned} \quad (4.110)$$

avec

$$\begin{aligned} \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2, \sigma_3 \sigma_4}^{(0)}(\mathbf{p}_i, \tau_i) &= \left[\delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} V_{\sigma_1 \sigma_2, \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3} \delta(\tau_1 - \tau_3) \delta(\tau_2 - \tau_4) \right. \\ &\quad \left. - \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} V_{\sigma_1 \sigma_2, \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4} \delta(\tau_1 - \tau_4) \delta(\tau_2 - \tau_3) \right] \delta(\tau_1 - \tau_2). \end{aligned} \quad (4.111)$$

Notons ici que le terme correspondant à la “transition” $\mathbf{p}_1 \sigma_1 \rightarrow \mathbf{p}_3 \sigma_3, \mathbf{p}_2 \sigma_2 \rightarrow \mathbf{p}_4 \sigma_4$ a un signe $+$ alors que celui correspondant à la “transition” $\mathbf{p}_1 \sigma_1 \rightarrow \mathbf{p}_4 \sigma_4, \mathbf{p}_2 \sigma_2 \rightarrow \mathbf{p}_3 \sigma_3$ a un signe $-$. Comme pour la fonction de Green à deux particules, les propriétés d'antisymétrie de $\Gamma^{(0)}$ montrent que seules trois composantes sont indépendantes $\Gamma_{\uparrow\uparrow, \uparrow\uparrow}^{(0)}$, $\Gamma_{\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow}^{(0)}$ et $\Gamma_{\downarrow\downarrow, \downarrow\downarrow}^{(0)}$. Nous posons donc $\Gamma_{\sigma\sigma'}^{(0)}(\mathbf{p}_i, \tau_i) \equiv \Gamma_{\sigma\sigma', \sigma\sigma'}^{(0)}(\mathbf{p}_i, \tau_i)$. En définissant la représentation de Fourier de la même manière que pour \mathcal{G}^{II} (cf. équation (4.63)), nous obtenons :

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}^{(0)}(\mathbf{p}_i, i\omega_{ni}) = V_{\sigma\sigma', \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3} - \delta_{\sigma\sigma'} V_{\sigma\sigma', \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4}, \quad (4.112)$$

où, à nouveau, nous supposons implicitement $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$ et $\omega_{n1} + \omega_{n2} = \omega_{n3} + \omega_{n4}$.

Nous pouvons désormais calculer la fonction de Green à deux particules à l'aide de l'équation (4.88) en procédant de la même manière que pour la fonction de Green à une particule. L'opérateur $U(\beta)$ du numérateur est développé en puissances de H_{int} et les valeurs moyennes sont évaluées à l'aide du théorème de Wick. Comme précédemment, nous devons considérer uniquement les diagrammes connexes, c'est-à-dire ceux dont les nœuds sont tous reliés à une des quatre lignes externes de propagateurs, les autres diagrammes étant compensés par le dénominateur $\langle U(\beta) \rangle_0$.

Ces diagrammes peuvent être séparés en deux groupes. Le premier de ces groupes contient les diagrammes pour lesquels les nœuds externes $1, \sigma$ et $3, \sigma$ sont reliés, de même que les nœuds $2, \sigma'$ et $4, \sigma'$, alors qu'il n'existe aucun chemin permettant d'aller de $1, \sigma$ à $4, \sigma'$ ou de $2, \sigma'$ à $3, \sigma$. De tels diagrammes se décomposent en deux parties qui ne sont connectées par aucune ligne, mais sont connexes dans le sens que nous l'avons défini. Il y a également d'autres diagrammes de ce type, ce sont ceux reliant $1, \sigma$ à $4, \sigma'$, $2, \sigma'$ à $3, \sigma$ alors que $1, \sigma$ et $3, \sigma$ ne sont pas reliés. Les diagrammes les plus simples sont

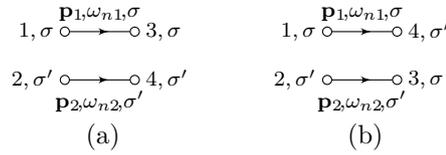


FIG. 4.6: Diagrammes d'ordre 0 contribuant à $\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_i, i\omega_{ni})$ et qui peuvent se décomposer en deux parties disjointes.

d'ordre 0 en H_{int} et sont représentés sur la figure 4.6. Ils correspondent respectivement aux expressions :

$$\begin{aligned} & -i\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}_1, i\omega_{n1})\mathcal{G}_{0\sigma'}(\mathbf{p}_2, i\omega_{n2})\beta\delta_{\omega_{n1}, \omega_{n3}}\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_3} , \\ & +i\delta_{\sigma\sigma'}\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}_1, i\omega_{n1})\mathcal{G}_{0\sigma'}(\mathbf{p}_2, i\omega_{n2})\beta\delta_{\omega_{n1}, \omega_{n4}}\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_4} . \end{aligned} \quad (4.113)$$

Les diagrammes d'ordre supérieur de ce type sont obtenus en remplaçant les deux propagateurs libres par des diagrammes plus complexes comme ceux des figures 4.3 et 4.4. Ainsi la somme de ces diagrammes donnera simplement des expressions analogues à (4.113) en remplaçant \mathcal{G}_0 par la fonction de Green exacte \mathcal{G} .

L'autre groupe de diagrammes contient l'ensemble des diagrammes qui ne peuvent pas être décomposés en deux parties disjointes. Le plus simple de ces diagrammes est d'ordre 1 en H_{int} . En utilisant l'équation (4.110), nous pouvons l'écrire simplement en fonction de $\Gamma^{(0)}$ en représentation de Fourier :

$$\frac{i}{\mathcal{V}}\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}_1, i\omega_{n1})\mathcal{G}_{0\sigma'}(\mathbf{p}_2, i\omega_{n2})\mathcal{G}_{0\sigma}(\mathbf{p}_3, i\omega_{n3})\mathcal{G}_{0\sigma'}(\mathbf{p}_4, i\omega_{n4})\Gamma_{\sigma\sigma'}^{(0)}(\mathbf{p}_i, i\omega_{ni}) . \quad (4.114)$$

Nous lui associons le diagramme de la figure 4.7 où $\Gamma^{(0)}$ est représenté par un carré. Les diagrammes d'ordre supérieur de ce type sont obtenus en remplaçant les propagateurs libres externes \mathcal{G}_0 par la fonction de Green exacte \mathcal{G} et en remplaçant $\Gamma_{\sigma\sigma'}^{(0)}$ par la somme de tous les diagrammes ayant quatre nœuds externes et ne pouvant pas se décomposer en deux parties. Cette somme est notée $\Gamma_{\sigma\sigma'}$ et appelée *vertex* ou opérateur d'interaction.

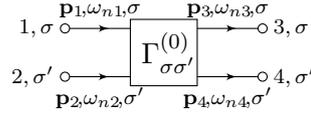


FIG. 4.7: Diagramme d'ordre 1 contribuant à $\mathcal{G}_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(\mathbf{p}_i, i\omega_{ni})$ et qui ne peut pas se décomposer en deux parties disjointes.

Nous pouvons associer à chacun des diagrammes de $\Gamma_{\sigma\sigma'}$ une expression analytique en utilisant les règles de Feynman que nous avons énoncées précédemment. Il y a cependant un signe supplémentaires comme nous pouvons le voir sur l'expression de $\Gamma_{\sigma\sigma'}^{(0)}$ (cf. équation (4.112)) correspondant aux deux diagrammes de la figure 4.8 : le signe de l'étape 5 doit être remplacée par $(-1)^{k+F+1}$ si la ligne issue de $1, \sigma$ se termine en $3, \sigma$ et $(-1)^{k+F}$ si elle se termine en $4, \sigma'$ (par conservation du spin, ce dernier cas n'est possible que si $\sigma = \sigma'$). Précisons que sur la figure 4.8, nous avons représenté les quatre propagateurs externes par des lignes en tirets pour rappeler qu'ils n'interviennent pas dans l'expression de $\Gamma_{\sigma\sigma'}$.

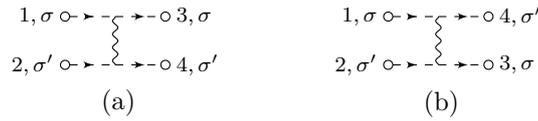


FIG. 4.8: Diagrammes d'ordre 1 contribuant à $\Gamma_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}_i, i\omega_{ni})$.

Enfin, en prenant la limite $T \rightarrow 0$ et en utilisant les quadrivecteurs $p_i = (\mathbf{p}_i, \omega_i)$, la relation entre $G_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}$ et $\Gamma_{\sigma\sigma'}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} G_{\sigma\sigma'}^{\text{II}}(p_1, p_2; p_3, p_4) &= G_{\sigma}(p_1)G_{\sigma'}(p_2)(2\pi)\delta(\omega_1 - \omega_3)\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_3} \\ &\quad - \delta_{\sigma\sigma'}G_{\sigma}(p_1)G_{\sigma'}(p_2)(2\pi)\delta(\omega_1 - \omega_4)\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_4} \\ &\quad + \frac{i}{\mathcal{V}}G_{\sigma}(p_1)G_{\sigma'}(p_2)G_{\sigma}(p_3)G_{\sigma'}(p_4)\Gamma_{\sigma\sigma'}(p_1, p_2; p_3, p_4). \end{aligned} \quad (4.115)$$

où la condition de conservation $p_1 + p_2 = p_3 + p_4$ est supposée implicitement.

• **Équation de Dyson.** — À l'aide de l'expression (4.115), nous pouvons réécrire l'équation d'évolution (4.54) que nous avons obtenue lorsque $T = 0$. Pour un Hamiltonien d'interaction couplant uniquement les fermions de spin opposé ($V_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma, -\sigma'}V$), nous trouvons :

$$\begin{aligned} G_{0\sigma}^{-1}(p)G_{\sigma}(p) &= 1 - \frac{i}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_1} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} e^{i\omega_1 0^+} V_{\mathbf{0}} G_{-\sigma}(p_1) G_{\sigma}(p) \\ &\quad + \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} e^{i\omega_1 0^+} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_2} G_{\sigma}(p_2) G_{-\sigma}(p + p_1 - p_2) G_{-\sigma}(p_1) \\ &\quad \quad \quad \times \Gamma_{\sigma, -\sigma}(p_2, p + p_1 - p_2; p, p_1) G_{\sigma}(p). \end{aligned} \quad (4.116)$$

Cette équation, reliant la fonction de Green au *vertex* est appelée équation de Dyson. En utilisant la relation entre G_σ et Σ_σ (cf. équation (4.104)), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \Sigma_\sigma(p) = & -\frac{i}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_1} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} e^{i\omega_1 0^+} V_0 G_{-\sigma}(p_1) \\ & + \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} e^{i\omega_1 0^+} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_2} G_\sigma(p_2) G_{-\sigma}(p + p_1 - p_2) G_{-\sigma}(p_1) \\ & \times \Gamma_{\sigma,-\sigma}(p_2, p + p_1 - p_2; p, p_1). \end{aligned} \quad (4.117)$$

Précisons que pour ces deux dernières équations, les fréquences sont réelles : les intégrales sur ω_1 et ω_2 ont lieu sur l'axe réel et ω est réelle.

Montrons maintenant que nous pouvons obtenir une équation analogue en resommant les diagrammes de Feynman contribuant à Σ_σ . Nous utilisons donc ici la limite $T \rightarrow 0$ du formalisme à température finie que nous avons présenté. Dans chacun des diagrammes que nous devons dessiner pour Σ_σ , il y a une première interaction du fermion de spin σ et de quadrivecteur $p = (\mathbf{p}, \omega)$ avec un fermion de spin $-\sigma$ et de quadrivecteur $p_1 = (\mathbf{p}_1, \omega_1)$. Juste avant cette interaction, le fermion de spin $-\sigma$ se propage librement donnant un facteur $G_{0-\sigma}(p_1)$ ou interagit avec d'autres particules comme c'est le cas sur le diagramme 4.4-(a). En resommant les différents diagrammes correspondant à toutes les insertions de self-énergies possibles pour ce fermion $-\sigma$, nous obtenons simplement le propagateur exact $G_{-\sigma}(p_1)$. Ainsi, en isolant ce facteur et en regroupant le reste des termes dans une fonction $\gamma_{\sigma,-\sigma}(p, p_1)$, nous obtenons le diagramme de la figure 4.9 où nous avons représenté la fonction de Green exacte par une ligne épaisse. Ce diagramme

$$\Sigma_\sigma(p) = \text{diagramme}$$

FIG. 4.9: Relation entre $\Sigma_\sigma(p)$ et $\gamma_{\sigma,-\sigma}(p, p_1)$.

correspond à l'équation :

$$\Sigma_\sigma(p) = \sum_{p_1} e^{\omega_1 0^+} \gamma_{\sigma,-\sigma}(p, p_1) G_{-\sigma}(p_1), \quad (4.118)$$

où nous avons utilisé la notation introduite dans l'équation (4.101) pour la somme sur le quadrivecteur p_1 . En particulier, l'intégrale sur la fréquence ω_1 a lieu sur l'axe imaginaire. Notons que le signe $-$ de la boucle de fermions a été inclus dans $\gamma_{\sigma,-\sigma}$. Physiquement, $\gamma_{\sigma,-\sigma}(p, p_1)$ décrit la diffusion de deux particules. À l'ordre le plus bas, il y a une seule interaction entre les deux fermions, comme c'est le cas pour les diagrammes 4.3 et 4.4-(a). Le transfert d'impulsion est alors nul et nous obtenons simplement V_0 . Cependant, comme pour le diagramme 4.4-(c), après cette interaction, les deux fermions peuvent se propager et interagir à nouveau. En notant p_2 le quadrivecteur du fermion σ après la première interaction, le quadrivecteur du fermion $-\sigma$ est $p + p_1 - p_2$ et la ligne ondulée d'interaction correspond à $-V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_2}$. À nouveau, les deux fermions peuvent se propager librement ou interagir avec d'autres particules. En resommant les différents

diagrammes, nous obtenons les propagateurs exacts $G_\sigma(p_2)$ et $G_{-\sigma}(p + p_1 - p_2)$. Nous avons ensuite un diagramme avec quatre nœuds externes et ne pouvant pas se décomposer en deux parties disjointes : la somme de ces diagrammes est exactement le *vertex* d'interaction $\Gamma_{\sigma,-\sigma}(p_2, p + p_1 - p_2; p, p_1)$. Ainsi, $\gamma_{\sigma,-\sigma}(p, p_1)$ est la somme des deux dia-

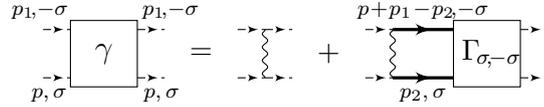


FIG. 4.10: Équation reliant $\gamma_{\sigma,-\sigma}(p, p_1)$ au *vertex* $\Gamma_{\sigma,-\sigma}$.

grammes représentés sur la figure 4.10 correspondant à l'équation :

$$\gamma_{\sigma,-\sigma}(p, p_1) = V_0 - \sum_{p_2} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_2} G_\sigma(p_2) G_{-\sigma}(p + p_1 - p_2) \Gamma_{\sigma,-\sigma}(p_2, p + p_1 - p_2; p, p_1). \quad (4.119)$$

Les équations (4.118) et (4.119) donnent alors :

$$\begin{aligned} \Sigma_\sigma(p) &= \sum_{p_1} e^{\omega_1 0^+} V_0 G_{-\sigma}(p_1) \\ &\quad - \sum_{p_1 p_2} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_2} G_\sigma(p_2) G_{-\sigma}(p + p_1 - p_2) G_{-\sigma}(p_1) \Gamma_{\sigma,-\sigma}(p_2, p + p_1 - p_2; p, p_1), \end{aligned} \quad (4.120)$$

qui est l'analogie de (4.117) pour des fréquences imaginaires.

4.2.5 Limite thermodynamique

Enfin, nous terminons cette section en indiquant qu'à partir de maintenant, nous nous placerons dans la limite thermodynamique $\mathcal{V} \rightarrow \infty$. Dans les expressions analytiques des diagrammes de Feynman, les sommes sur les vecteurs d'onde deviennent alors des intégrales :

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}_i} \cdots \rightarrow \int \frac{d\mathbf{p}_i}{(2\pi)^3} \cdots, \quad (4.121)$$

que nous noterons simplement $\sum_{\mathbf{p}_i}$ (sans le facteur $1/\mathcal{V}$).

4.3 Quelques exemples simples

Appliquons maintenant les techniques développées précédemment à deux situations simples : le problème à deux corps que nous avons déjà décrit dans le chapitre 1 à l'aide de l'équation de Schrödinger et le problème à trois corps qui nous permettra d'obtenir en particulier la longueur de diffusion atome-dimère.

4.3.1 Le problème à deux corps

Considérons un système de deux fermions de spin opposé. Comme $N_\sigma = 1$, nous avons $k_F^\sigma = 0$ et $\mu_\sigma = 0$. Les propagateurs libres sont donc donnés par $G_{0\sigma}(p) = [\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + i\delta]^{-1}$

et nous souhaitons calculer le *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1, p_2; p_3, p_4)$. Comme nous pouvons par exemple le vérifier sur les diagrammes à l'ordre 1 et 2 des figures 4.3 et 4.4, chaque boucle fermée de fermions de spin σ donne une contribution proportionnelle à $n_\sigma = N_\sigma/\mathcal{V}$ qui est nulle dans la limite thermodynamique. Ainsi, pour le *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$, les seuls diagrammes non nuls sont ceux ayant uniquement deux lignes de propagateurs : une ligne de propagateurs \downarrow reliant le nœud 1 au nœud 3 et une ligne de propagateurs \uparrow reliant le nœud 2 au nœud 4. Ces deux lignes sont alors nécessairement reliées par des interactions successives et $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ est la somme des diagrammes en échelle représentés sur la figure 4.11 que nous noterons $t_2(p_1, p_2; p_3, p_4)$.

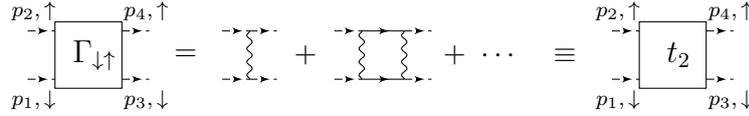


FIG. 4.11: Le *vertex* d'interaction pour un système de deux particules de spin opposé.

La sommation de cette série peut être effectuée en écrivant une équation de Bethe-Salpeter pour t_2 représentée sur la figure 4.12. Elle correspond à l'expression :

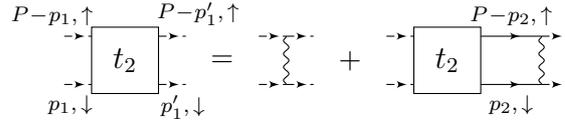


FIG. 4.12: Équation de Bethe-Salpeter pour $t_2(p_1, P - p_1; p'_1, P - p'_1)$.

$$\begin{aligned}
 t_2(p_1, P - p_1; p'_1, P - p'_1) &= V_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1} \\
 &\quad - \sum_{p_2} t_2(p_1, P - p_1; p_2, P - p_2) G_{0\uparrow}(P - p_2) G_{0\downarrow}(p_2) V_{\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_2},
 \end{aligned} \tag{4.122}$$

où nous avons utilisé à nouveau la notation introduite dans l'équation (4.101) : $\sum_{p_2} = \sum_{\mathbf{p}_2} \int d\omega_2 / (2i\pi)$. Comme l'interaction V est locale en temps, nous déduisons immédiatement de l'équation (4.122) que t_2 ne dépend pas de la fréquence ω'_1 . En écrivant une équation analogue à la figure 4.12 en isolant la première interaction à la place de la dernière, nous trouvons également que t_2 ne dépend pas de ω_1 . Ainsi, t_2 est une fonction de $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1$, de l'impulsion totale \mathbf{P} et de la fréquence totale Ω uniquement. L'intégration sur la fréquence ω_2 est alors effectuée en fermant le contour d'intégration autour du demi-plan $\text{Re } \omega_2 > 0$. Dans ce demi-plan, $G_{0\uparrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_2, \Omega - \omega_2)$ n'a pas de singularité. En effet, son unique pôle est $\omega_2 = \Omega - \varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_2)$ et sa partie réelle est négative, puisque Ω est sur l'axe imaginaire. La seule contribution provient donc du pôle de $G_{0\downarrow}(\mathbf{p}_2, \omega_2)$, pour $\omega_2 = \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{p}_2)$. Nous obtenons donc (le signe $-$ provient du sens du contour d'intégration) :

$$\int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{d\omega_2}{2i\pi} G_{0\uparrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_2, \Omega - \omega_2) G_{0\downarrow}(\mathbf{p}_2, \omega_2) = -G_{0\uparrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_2, \Omega - \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{p}_2)), \tag{4.123}$$

et l'équation (4.122) s'écrit :

$$t_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1; \{\mathbf{P}, \Omega\}) = V_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1} + \sum_{\mathbf{p}_2} \frac{V_{\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_2} t_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \{\mathbf{P}, \Omega\})}{\Omega - \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{p}_2) - \varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_2)}. \quad (4.124)$$

\mathbf{P} et Ω sont ici des paramètres. Dans le référentiel du centre de masse, nous avons $\mathbf{P} = \mathbf{0}$ et l'énergie totale est $\Omega = \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{p}_1) + \varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_1) = \mathbf{p}_1^2/2m_r$ où $m_r = m_{\downarrow}m_{\uparrow}/(m_{\downarrow} + m_{\uparrow})$ est la masse réduite. Comme nous l'avons déjà indiqué, l'équation (4.124) n'est valable a priori que pour Ω sur l'axe imaginaire. Or, son membre de droite est une fonction analytique de Ω en dehors de l'axe réel. Nous en déduisons donc, par prolongement analytique, qu'elle est valable dans tout le plan complexe des fréquences en dehors de l'axe réel. Pour l'évaluer en $\Omega = \mathbf{p}_1^2/2m_r$ qui est sur l'axe réel, nous devons utiliser la même procédure que pour la fonction de Green (cf. équation (4.30)), c'est-à-dire introduire une partie imaginaire infinitésimale positive puisque $\mathbf{p}_1^2/2m_r > 0$. Ainsi, en notant $\delta \rightarrow 0^+$, nous avons :

$$t_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \{\mathbf{0}, \mathbf{k}^2/2m_r\}) = V_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'} + 2m_r \sum_{\mathbf{q}} \frac{V_{\mathbf{k}' - \mathbf{q}} t_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}; \{\mathbf{0}, \mathbf{k}^2/2m_r\})}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{q}^2 + i\delta}. \quad (4.125)$$

Cette équation est identique à l'équation (1.17) satisfaite par la matrice T décrivant la collision de deux particules. t_2 est donc relié simplement à l'amplitude de diffusion par la relation :

$$t_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \{\mathbf{0}, \mathbf{k}^2/2m_r\}) = \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = -\frac{2\pi}{m_r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (4.126)$$

De manière générale, nous pouvons montrer [AGD76] que pour des quasi-particules de résidus z_1 et z_2 , l'amplitude de diffusion est donnée par une expression similaire : nous devons simplement remplacer le *vertex* t_2 par $z_1 z_2 \Gamma$ où Γ est le *vertex* d'interaction entre les deux quasi-particules.

Nous pouvons également calculer l'expression générale de t_2 pour le potentiel modèle introduit au chapitre 1 (cf. équation (1.24)). Comme $V_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1} = g$, nous déduisons que $t_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1; \{\mathbf{P}, \Omega\})$ ne dépend alors pas de \mathbf{p}'_1 . En utilisant l'équation analogue à la figure 4.12 obtenue en isolant la première interaction à la place de la dernière, nous obtenons que t_2 est une fonction de \mathbf{P} et Ω uniquement. Ceci résulte simplement de la localité en espace et en temps de l'interaction. Il vient alors :

$$t_2(\mathbf{P}, \Omega)^{-1} = g^{-1} - \sum_{\mathbf{p}_2} \frac{1}{\Omega - \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{p}_2) - \varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_2) + i\delta}. \quad (4.127)$$

Dans la somme, nous pouvons isoler l'énergie du centre de masse en effectuant le changement de variable $\mathbf{p}_2 = \gamma_{\downarrow} \mathbf{P} + \mathbf{k}$ avec $\gamma_{\downarrow} = m_{\downarrow}/M$ et $M = m_{\downarrow} + m_{\uparrow}$ la masse totale. De plus, la constante de couplage g doit être remplacée par son expression à l'aide de la longueur de diffusion (1.28) pour corriger la divergence ultraviolette. Nous obtenons :

$$t_2(\mathbf{P}, \Omega)^{-1} = \frac{m_r}{2\pi a} + \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{\mathbf{k}^2/2m_r + \mathbf{P}^2/2M - \Omega - i\delta} - \frac{2m_r}{k^2} \right]. \quad (4.128)$$

Cette dernière expression peut être calculée simplement, elle fournit :

$$t_2(\mathbf{P}, \Omega) = \frac{2\pi/m_r}{a^{-1} - \sqrt{2m_r(\mathbf{P}^2/2M - \Omega - i\delta)}}. \quad (4.129)$$

Ainsi, le *vertex* t_2 a un pôle pour $\Omega = -1/2m_r a^2 + P^2/2M$. Cette valeur correspond à l'énergie de l'état lié avec une impulsion totale \mathbf{P} . Le résidu au pôle est $2\pi/m_r^2 a$. Nous voyons également que t_2 a une coupure sur la demi-droite $[P^2/2M, +\infty[$ correspondant aux énergies du continuum. Enfin, nous pouvons calculer l'amplitude de diffusion à l'aide de la relation (4.126) ; nous retrouvons l'expression usuelle $f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -1/[a^{-1} + ik]$.

4.3.2 Le problème à trois corps

Nous allons maintenant appliquer les méthodes diagrammatiques pour obtenir la longueur de diffusion atome-dimère a_3 . Ce résultat a été dérivé pour la première fois par Skorniakov et Ter-Martirosian [STM56] dans le cas de particules de masse égale. Considérons donc un système de trois fermions, deux fermions de spin \uparrow et de masse m_\uparrow et un fermion de spin \downarrow de masse m_\downarrow . Le *vertex* d'interaction entre un fermion \uparrow et un fermion \downarrow est donné par l'équation (4.129). Au voisinage du pôle $\Omega \approx -\epsilon_b$ avec $\epsilon_b = 1/2m_r a^2$, nous avons :

$$t_2(P) \approx \frac{2\pi/m_r^2 a}{\Omega - \mathbf{P}^2/2M + \epsilon_b + i\delta}. \quad (4.130)$$

Ainsi, t_2 est analogue au propagateur bosonique d'une quasi-particule de masse M et de résidu $2\pi/m_r^2 a$. Nous le représenterons dans cette section par le diagramme de la figure 4.13-(a). Nous devons considérer le *vertex* atome-dimère décrivant l'interaction

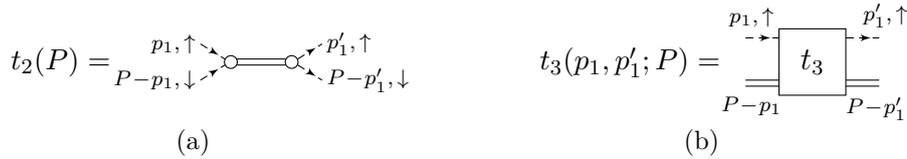


FIG. 4.13: Représentation du *vertex* t_2 décrivant la propagation du dimère $\uparrow - \downarrow$ et du *vertex* d'interaction atome-dimère t_3 .

entre un fermion \uparrow de quadrivecteurs p_1 en entrée et p'_1 en sortie, et un dimère de quadrivecteurs $P - p_1$ en entrée et $P - p'_1$ en sortie. Nous le noterons $t_3(p_1, p'_1; P)$ et le représenterons par le diagramme de la figure 4.13-(b) (sans les pattes externes).

Le processus le plus simple qui contribue à ce *vertex* est l'échange des deux fermions \uparrow , il correspond au premier diagramme de la figure 4.14. Son expression analytique est $-G_{0\downarrow}(P - p_1 - p'_1)$, le signe $-$ provenant de l'échange des deux fermions. De manière générale, après ce premier échange de fermions, nous nous retrouvons avec un fermion \uparrow et un dimère. Les différents processus possibles sont donc exactement décrits par le *vertex* t_3 . Nous obtenons ainsi l'équation intégrale suivante, correspondant aux diagrammes de

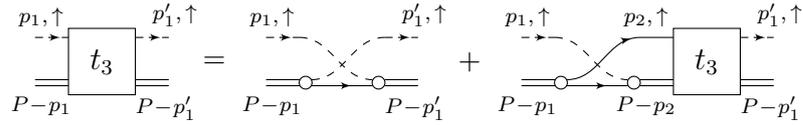


FIG. 4.14: Représentation diagrammatique de l'équation (4.131) pour le *vertex* atome-dimère $t_3(p_1, p'_1; P)$.

la figure 4.14 :

$$t_3(p_1, p'_1; P) = -G_{0\downarrow}(P - p_1 - p'_1) - \sum_{p_2} G_{0\downarrow}(P - p_1 - p_2) G_{0\uparrow}(p_2) t_2(P - p_2) t_3(p_2, p'_1; P). \quad (4.131)$$

Puisque nous souhaitons calculer la longueur de diffusion atome-dimère, nous devons considérer la limite de basse énergie $p_1 = p_2 = 0$ et $P = \{\mathbf{0}, -\epsilon_b\}$. En effet, par analogie avec l'équation (4.126) et en tenant compte du résidu de quasi-particule du dimère, la longueur de diffusion atome-dimère est obtenue à partir de t_3 à l'aide de la relation [BvK98, BKK⁺06] :

$$\frac{2\pi}{m_r^2 a} t_3(0, 0; \{\mathbf{0}, -\epsilon_b\}) = \frac{2\pi}{m_r^T} a_3, \quad (4.132)$$

où $m_r^T = m_\uparrow M / (m_\uparrow + M)$ est la masse réduite du système atome-dimère. Dans l'équation (4.131), p_2 et P sont des paramètres, nous pouvons donc les remplacer par leur valeur ($p_2 = 0$ et $P = \{\mathbf{0}, -\epsilon_b\}$). Comme pour le calcul de t_2 , l'intégration sur la fréquence ω_2 est effectuée en fermant le contour autour du demi-plan $\text{Re } \omega_2 > 0$. Dans ce demi-plan, $t_2(\mathbf{p}_2, -\epsilon_b - \omega_2)$ et $t_3(p_2, 0; \{\mathbf{0}, -\epsilon_b\})$ sont analytiques. En effet, pour t_3 cette propriété résulte simplement de l'équation (4.131). Si nous supposons par exemple de manière auto-cohérente que le résultat est vrai dans le membre de droite de l'équation, nous pouvons alors vérifier que les deux termes sont analytiques, et qu'il en est de même pour t_3 . De plus, comme ω_1 est sur l'axe imaginaire, $G_{0\downarrow}(P - p_1 - p_2)$ n'a également pas de singularité. La seule contribution provient donc du pôle de $G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, \omega_2)$ pour $\omega_2 = \varepsilon_\uparrow(\mathbf{p}_2) - i\delta$ et le membre de droite de l'équation (4.131) ne fait intervenir que la valeur *on-the-shell* de t_3 : $t_3(\{\mathbf{p}_2, \varepsilon_\uparrow(\mathbf{p}_2)\}, 0; \{\mathbf{0}, -\epsilon_b\})$. Nous pouvons donc limiter p_1 à sa valeur *on-the-shell*, $p_1 = \{\mathbf{p}_1, \varepsilon_\uparrow(\mathbf{p}_1)\}$.

En utilisant les variables réduites $\mathbf{x} = a\mathbf{p}_1$ et $\mathbf{x}' = a\mathbf{p}_2$, nous avons $[G_{0\downarrow}(\mathbf{p}_1, -\epsilon_b - \varepsilon_\uparrow(\mathbf{p}_1))]^{-1} = -\epsilon_b(1+x^2)$, $[G_{0\downarrow}(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2, -\epsilon_b - \varepsilon_\uparrow(\mathbf{p}_1) - \varepsilon_\uparrow(\mathbf{p}_2))]^{-1} = -\epsilon_b(1+x^2+x'^2 + R'\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}')$ avec $R' = 2m_r/m_\downarrow$ ($R' = 1$ pour des fermions de même masse) et $t_2(\mathbf{p}_2, -\epsilon_b - \varepsilon_\uparrow(\mathbf{p}_2)) = (2\pi a/m_r)/(1 - \sqrt{1 + Rx^2})$ avec $R = m_r/m_r^T$ ($R = 3/4$ pour des masses égales). En effectuant le changement de fonction inconnue :

$$a_3(\mathbf{x}) = \frac{m_r^T}{2m_r^2 a} (1 + \sqrt{1 + Rx^2}) t_3(\{\mathbf{p}_1, \varepsilon_\uparrow(\mathbf{p}_1)\}, 0; \{\mathbf{0}, -\epsilon_b\}), \quad (4.133)$$

nous obtenons l'équation :

$$\frac{Ra_3(\mathbf{x})}{1 + \sqrt{1 + Rx^2}} = \frac{a}{1 + x^2} - 4\pi \int \frac{d^3\mathbf{x}'}{(2\pi)^3} \frac{a_3(\mathbf{x}')}{x'^2(1 + x^2 + x'^2 + R'\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}')}, \quad (4.134)$$

et la longueur de diffusion atome-dimère est donnée par $a_3 = a_3(\mathbf{0})$. Notons que $a_3(\mathbf{x})$

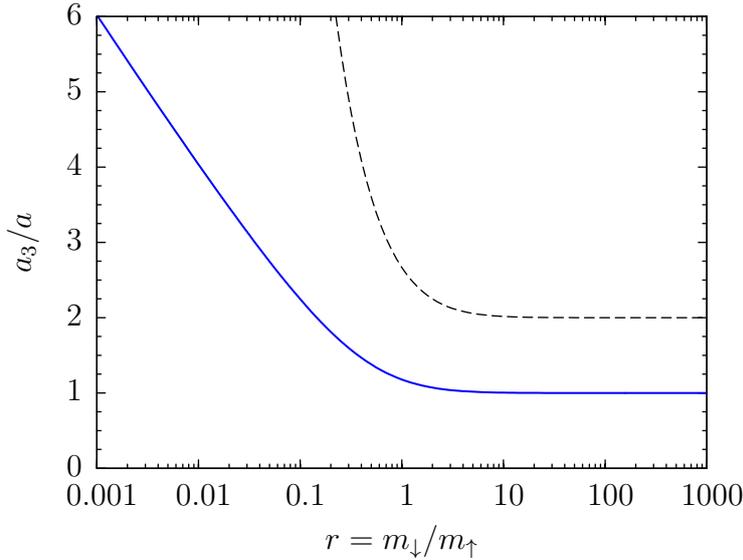


FIG. 4.15: Longueur de diffusion atome-dimère a_3 en trait plein et approximation de Born a_3^B en tirets, en fonction du rapport des masses $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$.

ne dépend que de la norme de \mathbf{x} , cette équation est donc une équation intégrale à une dimension. L'approximation de Born consiste à retenir uniquement le premier diagramme de la figure 4.14 correspondant à l'échange des deux fermions \uparrow , cela revient à négliger l'intégrale de l'équation (4.134) et fournit :

$$a_3^B = \frac{2}{R} a = \frac{2m_r^T}{m_r} a = \frac{2(r+1)^2}{r(r+2)} a, \quad (4.135)$$

où nous avons noté $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$. En particulier, pour des masses égales, nous obtenons $a_3^B = 8/3 a$. De manière générale, la résolution numérique de cette équation ne pose aucune difficulté. Après discrétisation de l'intégrale, on se ramène à la résolution d'un système linéaire. Pour des masses égales, nous obtenons le résultat bien connu : $a_3 = 1.18 a$ [STM56]. La variation de a_3 en fonction du rapport des masses $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$ est représentée sur la figure 4.15. Pour $r \rightarrow 0$, a_3/a se comporte en $\ln r$ [Pet03] alors que l'approximation de Born a_3^B/a se comporte en $1/r$. Dans la limite $r \rightarrow \infty$, la longueur de diffusion atome-dimère est $a_3 = a$, alors que l'approximation de Born donne $a_3^B = 2a$.

Ces techniques diagrammatiques peuvent également être utilisées pour déterminer la longueur de diffusion dimère-dimère a_B . Pour un système de 4 fermions de même masse, la solution exacte de ce problème a été obtenue pour la première fois par Petrov, Salomon et Shlyapnikov [PSS04, PSS05]. Par résolution directe de l'équation de Schrödinger, ils ont trouvé $a_B = 0.60 a$. Précédemment, Haussmann [Hau93] avait obtenu, dans le cadre de l'approximation de Born, $a_B = 2a$. En se limitant à certains diagrammes décrivant une interaction répétée entre les fermions de ces bosons composites, Pieri et Strinati [PS00] ont ensuite obtenu $a_B \approx 0.75 a$. Finalement, Brodsky *et al.* [BKK⁺06] ont confirmé le résultat de Petrov *et al.* en utilisant une approche diagrammatique exacte. On obtient alors une équation intégrale à trois dimensions et la résolution numérique est cette fois-ci un peu plus complexe.

Description diagrammatique du polaron et de l'état lié

Nous revenons désormais au problème à $N + 1$ corps que nous avons déjà étudié dans le chapitre 2 à l'aide d'un développement général de la fonction d'onde. Nous utilisons ici les techniques diagrammatiques que nous avons rappelées dans le chapitre précédent. Dans une première partie, nous montrons comment il est possible d'obtenir, à l'aide de la fonction de Green, le potentiel chimique et la masse effective de l'unique atome \downarrow , ainsi que la description d'un éventuel état lié. Nous établissons ensuite les résultats fournis par l'approximation usuelle de la matrice T , puis généralisons notre traitement du chapitre 2 en sélectionnant une nouvelle classe de diagrammes. Nous obtenons ainsi une solution essentiellement exacte du problème, à la fois pour le polaron et pour l'état lié. Enfin, l'étude de la limite BEC montre que nos équations se réduisent aux équations exactes du problème à trois corps. Le contenu de ce chapitre a été publié en partie dans [CGL09, GC10b].

5.1 Polaron et état lié

5.1.1 Fonctions de Green

Considérons à nouveau un système composé de N fermions de spin \uparrow et de masse m_\uparrow interagissant avec un unique fermion de spin \downarrow et de masse m_\downarrow via le potentiel modèle introduit dans le chapitre 1 (cf. équation (1.24)). L'Hamiltonien du système s'écrit alors :

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{P}} E_{\mathbf{P}} b_{\mathbf{P}}^\dagger b_{\mathbf{P}} + g \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} b_{\mathbf{P}}^\dagger b_{\mathbf{P}'}, \quad (5.1)$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2m_\uparrow$, $E_{\mathbf{P}} = \mathbf{P}^2/2m_\downarrow$, $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{P},\mathbf{k}'+\mathbf{P}'}$ et $c_{\mathbf{k}}$ et $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ sont les opérateurs de destruction et de création d'un atome de spin \uparrow alors que $b_{\mathbf{P}}$ et $b_{\mathbf{P}}^\dagger$ sont ceux de l'atome de spin \downarrow . Rappelons également que nous devons introduire une coupure k_c et que la constante de couplage g tend vers 0 lorsque $k_c \rightarrow \infty$, g étant reliée à la longueur de diffusion par la relation $m_r/(2\pi a) = g^{-1} + \sum^{k_c} 2m_r/k^2$.

Nous pouvons alors appliquer le formalisme des diagrammes de Feynman que nous avons développé dans le chapitre précédent. Comme nous l'avons déjà remarqué lors de l'étude du problème à deux ou trois corps, chaque boucle fermée de fermions de spin σ donne une contribution proportionnelle à $n_\sigma = N_\sigma/\mathcal{V}$. Comme $N_\downarrow = 1$, la densité de fermions \downarrow est nulle $n_\downarrow = 0$, dans la limite thermodynamique $\mathcal{V} \rightarrow \infty$, et tous les diagrammes possédant une boucle de fermions \downarrow sont nuls. Or, chaque diagramme d'ordre supérieur ou égal à un, contribuant à la fonction de Green des fermions \uparrow , fait intervenir une interaction avec un fermion \downarrow , et par conséquent une boucle de fermions \downarrow . Nous en déduisons donc que le propagateur des atomes \uparrow est exactement le propagateur libre :

$$G_\uparrow(\mathbf{p}, \omega) = G_{0\uparrow}(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\mathbf{p}} + \mu_\uparrow \pm i\delta}, \quad (5.2)$$

le signe $+$ correspondant à $|\mathbf{p}| > k_F$ et le signe $-$ à $|\mathbf{p}| < k_F$.

De la même manière, pour la fonction de Green de l'atome \downarrow , seuls contribuent les diagrammes ayant une seule ligne de propagateurs \downarrow reliant les deux nœuds externes. Par exemple, le diagramme de la figure 4.4-(a) est nul dans la limite thermodynamique. La structure de ces diagrammes est simple : ils correspondent à la propagation d'un fermion \downarrow interagissant avec une ou plusieurs boucles de fermions \uparrow . En notant $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ la self-énergie de l'atome \downarrow , somme des diagrammes irréductibles, nous avons alors l'équation de Dyson (cf. équation (4.104)) :

$$G_\downarrow^{-1}(\mathbf{p}, \omega) = G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{p}, \omega) - \Sigma(\mathbf{p}, \omega) = \omega - E_{\mathbf{p}} + \mu_\downarrow - \Sigma(\mathbf{p}, \omega). \quad (5.3)$$

Indiquons maintenant une conséquence importante de la forme du potentiel. Sa transformée de Fourier est constante et égale à g . En prenant en compte le signe $(-1)^k$ du point 5. des règles de Feynman (cf. section 4.2.3), nous en déduisons que nous devons associer à chaque ligne ondulée le facteur $-g$. Or $g \rightarrow 0$, lorsque la coupure $k_c \rightarrow \infty$. Nous pouvons alors vérifier que chaque diagramme pris indépendamment est nul. Par exemple, la contribution à la self-énergie du terme de Hartree donné par le diagramme de la figure 4.3 est simplement l'énergie de champ moyen gn_\uparrow , et tend vers 0 lorsque $g \rightarrow 0$. Pour obtenir une self-énergie non nulle, nous devons donc resommer une infinité de diagrammes, la divergence de la série lorsque $k_c \rightarrow \infty$ étant alors compensée par le fait que $g \rightarrow 0$, donnant ainsi une contribution finie.

5.1.2 Calcul du potentiel chimique

Dans la limite thermodynamique, les potentiels chimiques μ_\uparrow et μ_\downarrow sont donnés par les équations implicites (cf. équation (4.64)) :

$$n_\sigma = \sum_{\mathbf{p}} n_{\sigma\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}} \int \frac{d\omega}{2i\pi} e^{\omega 0^+} G_\sigma(\mathbf{p}, \omega), \quad (5.4)$$

où nous avons utilisé la notation $\sum_{\mathbf{p}} = \int d\mathbf{p}/(2\pi)^3$ et l'intégration sur la fréquence ω a lieu sur l'axe imaginaire. Pour évaluer cette intégrale, nous pouvons fermer le contour d'intégration autour du demi-plan $\text{Re } \omega < 0$, l'arc à l'infini ne contribuant pas à cause du

facteur $e^{\omega 0^+}$. Pour les atomes \uparrow , puisque $G_{\uparrow}(\mathbf{p}, \omega) = G_{0\uparrow}(\mathbf{p}, \omega)$, nous obtenons simplement $\theta(\mu_{\uparrow} - \epsilon_{\mathbf{p}})$. La relation $n_{\uparrow} = k_F^3/(6\pi^2)$ fournit alors immédiatement $\mu_{\uparrow} = E_F = k_F^2/2m_{\uparrow}$.

Pour le spin \downarrow , comme $N_{\downarrow} = 1$, nous sommes, dans la limite thermodynamique, juste à la frontière entre une densité d'atomes \downarrow nulle $n_{\downarrow} = N_{\downarrow}/\mathcal{V} = 0$, et une densité non nulle $n_{\downarrow} \neq 0$. Nous en déduisons donc que $G_{\downarrow}(\mathbf{p}, \omega)$ doit être analytique dans le demi-plan $\text{Re } \omega < 0$, pour que le résultat de l'intégration sur ω soit nul. Ceci est par exemple le cas pour des fermions libres avec $\mu_{\downarrow} < 0$. En effet, l'unique pôle de $G_{0\downarrow}$, $\omega = \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu_{\downarrow}$, se situe alors dans le demi-plan $\text{Re } \omega > 0$. Notons également que pour des valeurs très négatives de μ_{\downarrow} , la self-énergie devient négligeable et l'équation (5.3) montre que $G_{\downarrow}(\mathbf{p}, \omega)$ est analytique dans le demi-plan $\text{Re } \omega < 0$. Plus précisément, puisque nous sommes à la frontière d'une densité non nulle, le potentiel chimique solution de l'équation (5.4) correspond à la valeur de μ_{\downarrow} pour laquelle, une singularité de $G_{\downarrow}(\mathbf{p}, \omega)$ a juste atteint la frontière de ce demi-plan. Or, nous avons vu que les singularités de G_{\downarrow} se situent sur l'axe réel des fréquences. Ainsi, le potentiel chimique de l'atome \downarrow est la plus petite des valeurs de μ_{\downarrow} pour lesquelles $G_{\downarrow}(\mathbf{p}, \omega)$ a une singularité en $\omega = 0$.

L'équation (5.3) montre qu'une singularité de $G_{\downarrow}(\mathbf{p}, \omega)$ pour $\omega = 0$ peut avoir deux origines :

1. un pôle de $G_{\downarrow}(\mathbf{p}, \omega)$, correspondant à

$$G_{\downarrow}^{-1}(\mathbf{p}, 0) = G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{p}, 0) - \Sigma(\mathbf{p}, 0) = \mu_{\downarrow} - E_{\mathbf{p}} - \Sigma(\mathbf{p}, 0) = 0. \quad (5.5)$$

Cette condition définit une première valeur du potentiel chimique associée à une quasi-particule que nous appellerons polaron. Nous montrerons que cette quasi-particule est notamment présente du côté BCS ($a < 0$) et correspond à l'état décrit par la fonction d'onde considérée dans le chapitre 2 ;

2. une singularité de $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ pour $\omega = 0$. Nous montrerons que cette condition correspond à la formation d'un état lié et se produit notamment dans la limite BEC ($1/k_F a \rightarrow \infty$) où un état fortement lié apparaît entre l'atome \downarrow et un atome \uparrow .

Ainsi, le potentiel chimique physique correspond naturellement à la plus petite des deux valeurs ainsi définies. De plus, en faisant varier l'interaction, nous nous attendons à une transition polaron-état lié.

5.1.3 Le polaron

Dans l'équation (5.5), comme nous le vérifierons par la suite, la plus petite valeur de l'énergie de l'atome \downarrow est attendue pour $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Elle correspond au potentiel chimique du polaron :

$$\mu_{\downarrow} = \Sigma(\mathbf{0}, 0). \quad (5.6)$$

De manière générale, l'équation $G_{\downarrow}^{-1}(\mathbf{p}, \omega) = 0$ définit implicitement ω en fonction de \mathbf{p} et $E[\mathbf{p}] = \mu_{\downarrow} + \omega$ est alors l'énergie d'une quasi-particule d'impulsion \mathbf{p} . Ainsi, la masse effective du polaron est obtenue à partir du comportement à petit \mathbf{p} de $E[\mathbf{p}]$: pour $p \rightarrow 0$, $E[\mathbf{p}] \simeq \mu_{\downarrow} + p^2/2m^*$. L'équation (5.3) montre alors que $E[\mathbf{p}]$ est donnée par l'équation implicite :

$$E[\mathbf{p}] = E_{\mathbf{p}} + \Sigma(\mathbf{p}, E[\mathbf{p}] - \mu_{\downarrow}). \quad (5.7)$$

Nous en déduisons :

$$\frac{1}{m^*} = \left. \frac{dE[\mathbf{p}]}{d(p^2/2)} \right|_{p=0} = \frac{1}{m_\downarrow} + \frac{\partial \Sigma}{\partial(p^2/2)}(\mathbf{0}, 0) + \frac{1}{m^*} \frac{\partial \Sigma}{\partial \omega}(\mathbf{0}, 0), \quad (5.8)$$

c'est-à-dire :

$$\frac{m^*}{m_\downarrow} = \frac{1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \omega}(\mathbf{0}, 0)}{1 + 2m_\downarrow \frac{\partial \Sigma}{\partial p^2}(\mathbf{0}, 0)}. \quad (5.9)$$

5.1.4 L'état lié

Comme nous l'avons déjà vu lors de la résolution du problème à deux corps, l'existence d'un état lié se manifeste par la présence d'un pôle dans le *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$. Précisons comment ce pôle peut induire une singularité dans la self-énergie $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ de l'atome \downarrow pour $\omega = 0$. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 4, en isolant le propagateur du premier atome \uparrow interagissant avec l'atome \downarrow , Σ peut s'exprimer à l'aide de la fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}$. L'équation (4.118) s'écrit ici :

$$\Sigma(p) = \Sigma(\mathbf{p}, \omega) = \sum_{p_1} e^{\omega_1 0^+} \gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{p}_1, \omega_1) G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_1, \omega_1), \quad (5.10)$$

où nous avons utilisé les quadrivecteurs $p = (\mathbf{p}, \omega)$, $p_1 = (\mathbf{p}_1, \omega_1)$ et la notation introduite dans l'équation (4.101) : $\sum_{p_1} = \sum_{\mathbf{p}_1} \int d\omega_1 / (2i\pi)$. $\gamma_{\downarrow\uparrow}$ peut s'exprimer à l'aide du *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ (cf. équation (4.119)). Puisque le terme de Hartree est ici nul lorsque nous prenons $g \rightarrow 0$, nous avons uniquement le diagramme de la figure 5.1.

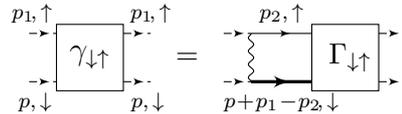


FIG. 5.1: Équation reliant $\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1)$ au *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$.

Dans le vide, c'est-à-dire en présence d'un unique atome \uparrow , nous avons $\Gamma_{\downarrow\uparrow} = t_2$, puis :

$$\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1) = -g \sum_{\mathbf{p}_2} \int \frac{d\omega_2}{2i\pi} G_\downarrow(p + p_1 - p_2) G_{0\uparrow}(p_2) t_2(p + p_1). \quad (5.11)$$

L'intégration sur ω_2 est effectuée en fermant le contour autour du demi-plan $\text{Re } \omega_2 > 0$. Comme ω et ω_1 sont sur l'axe imaginaire, $\text{Re}(\omega + \omega_1 - \omega_2) < 0$ et $G_\downarrow(p + p_1 - p_2)$ n'a pas de pôle dans ce demi-plan. Seul contribue le pôle de $G_{0\uparrow}(p_2)$ et nous obtenons $G_\downarrow(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2, \omega + \omega_1 - \epsilon_{\mathbf{p}_2})$. La somme sur \mathbf{p}_2 est alors divergente. Après introduction de la coupure $k_c \rightarrow \infty$ et multiplication par $g \rightarrow 0$, nous obtenons simplement $\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1) = t_2(p + p_1)$. Cela résulte de la remarque importante suivante : le *vertex* t_2 est invariant par ajout d'une ligne d'interaction en entrée ou en sortie. En effet, c'est une conséquence immédiate de l'équation de Bethe-Salpeter (cf. figure 4.12) et de la nullité du terme de

Hartree pour $g \rightarrow 0$. En utilisant l'expression (4.129), nous avons donc :

$$\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{p}_1, \omega_1) = t_2(p + p_1) = \frac{2\pi/m_r}{a^{-1} - \sqrt{2m_r(\mathbf{P}^2/2M - \omega - \omega_1)}}, \quad (5.12)$$

où M est la masse totale, m_r la masse réduite et $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1$ l'impulsion totale. La fonction $\omega_1 \mapsto \gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{p}_1, \omega_1)$ possède alors un pôle pour $\omega_1 = -1/2m_r a^2 - \omega + \mathbf{P}^2/2M$ et une coupure sur la demi-droite $[-\omega + \mathbf{P}^2/2M, +\infty[$.

Par analogie avec la situation dans le vide, nous trouvons que la fonction $\omega_1 \mapsto \gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{p}_1, \omega_1)$ possède un pôle qui est une fonction décroissante de ω . Pour des valeurs très négatives de $\text{Re}\omega$, ce pôle se situe dans le demi-plan $\text{Re}\omega_1 > 0$. Comme $n_{\downarrow} = 0$, $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ est analytique dans le demi-plan $\text{Re}\omega < 0$. L'équation (5.10) montre alors que, lorsque ω décrit ce demi-plan, ce pôle ne doit pas franchir l'axe imaginaire (qui est le chemin d'intégration sur la fréquence ω_1). Enfin, $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ aura une singularité pour $\omega = 0$, si ce pôle a juste atteint la frontière $\omega_1 = 0$ lorsque $\omega = 0$. La condition s'écrit donc $[\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, 0; \mathbf{p}_1, 0)]^{-1} = 0$ qui est une équation implicite pour la seule variable μ_{\downarrow} . La résolution de cette équation fournit naturellement une valeur de μ_{\downarrow} qui dépend des deux vecteurs \mathbf{p} et \mathbf{p}_1 et qui s'identifie à l'énergie d'une quasi-particule. Nous la noterons $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ et réserverons la notation μ_{\downarrow} au potentiel chimique. Ainsi, dans l'expression de $\gamma_{\downarrow\uparrow}$, nous devons remplacer μ_{\downarrow} par E . Puisque $\gamma_{\downarrow\uparrow}$ est en fait une fonction de $\mu_{\downarrow} + \omega$ (comme c'est le cas pour la fonction de Green $G_{0\downarrow}$), cela revient à l'évaluer en $\omega = E - \mu_{\downarrow}$ et nous obtenons l'équation :

$$[\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, E - \mu_{\downarrow}; \mathbf{p}_1, 0)]^{-1} = 0 \quad (5.13)$$

qui définit de manière implicite $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$. De plus, cette énergie vérifie la propriété :

$$E \leq E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1] \Leftrightarrow \gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, E - \mu_{\downarrow}; \mathbf{p}_1, \omega_1) \text{ n'a pas de singularité pour } \text{Re}\omega_1 < 0. \quad (5.14)$$

Nous déduisons alors que le potentiel chimique de l'état lié correspond à la plus petite valeur de $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ qui est attendue pour $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 = \mathbf{0}$ (nous vérifierons ce point par la suite). Il est donc donné par la condition :

$$[\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}, 0)]^{-1} = 0. \quad (5.15)$$

Enfin, la masse effective de l'état lié est donnée par le comportement de $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ à petite impulsion totale $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1$: pour $P \rightarrow 0$, $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1] \simeq \mu_{\downarrow} + P^2/2m^*$. Remarquons que dans le vide, nous retrouvons bien $m^* = M$ à l'aide de l'expression (5.12).

5.1.5 Quelques remarques pratiques

Comme nous l'avons déjà mentionné, le potentiel chimique physique de l'atome \downarrow correspond à la plus petite des deux valeurs données par les conditions (5.6) et (5.15). La propriété (5.14) montre alors que $\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{p}_1, \omega_1)$ n'a pas de singularité dans le demi-plan $\text{Re}\omega_1 < 0$. Ainsi, nous pouvons désormais simplifier l'équation (5.10) en effectuant l'intégration sur la fréquence ω_1 . Le contour d'intégration est fermé autour du demi-

plan $\text{Re}\omega_1 < 0$, l'arc à l'infini ne contribuant pas à cause du facteur $e^{\omega_1 0^+}$. La seule contribution provient du pôle de $G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_1, \omega_1)$, pour $\omega_1 = \omega_{\mathbf{p}_1} \equiv \epsilon_{\mathbf{p}_1} - \mu_{\uparrow}$. La contrainte $\text{Re}\omega_{\mathbf{p}_1} < 0$ impose $p_1 < k_F$. En remplaçant \mathbf{p}_1 par \mathbf{q} , nous obtenons l'équation :

$$\Sigma(\mathbf{p}, \omega) = \sum'_{\mathbf{q}} \gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}), \quad (5.16)$$

où nous avons utilisé la notation \sum' du chapitre 2 qui signifie que la somme est implicitement limitée à $q < k_F$. Nous voyons sur ce premier exemple une propriété que nous utiliserons souvent par la suite pour évaluer les intégrales sur les fréquences des fermions \uparrow . Si le propagateur $G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_1, \omega_1)$ est dirigé vers l'arrière, nous fermerons le contour d'intégration pour $\text{Re}\omega_1 < 0$ et l'intégrale se ramène à l'évaluation $\omega_1 = \omega_{\mathbf{p}_1}$ avec la contrainte $p_1 < k_F$. S'il est dirigé vers l'avant, nous fermerons le contour pour $\text{Re}\omega_1 > 0$ et l'intégrale se ramène à l'évaluation $\omega_1 = \omega_{\mathbf{p}_1}$ avec la contrainte $p_1 > k_F$.

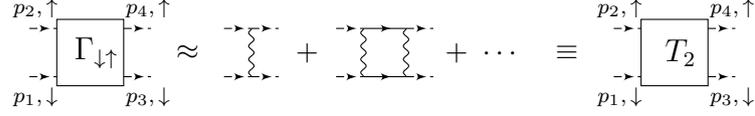
Remarquons également que le calcul de la masse effective de l'atome \downarrow nécessite, pour le polaron et l'état lié, le calcul de l'énergie E de la quasi-particule donnée respectivement par les équations (5.7) et (5.13). Dans ces deux équations, l'évaluation en $\omega = E - \mu_{\downarrow}$ revient en fait à remplacer μ_{\downarrow} par E dans les différentes fonctions mises en jeu (G_{\downarrow} , $G_{0\downarrow}$, Σ , $\gamma_{\downarrow\uparrow}$, $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$...) et à évaluer en $\omega = 0$. C'est ce que nous ferons de manière implicite à partir de maintenant. De plus, comme cette énergie est attendue négative (au moins pour les petites valeurs de \mathbf{p} qui nous intéressent), nous utiliserons souvent $E = -|E|$.

5.2 L'approximation de la matrice T

Comme nous l'avons déjà mentionné, le calcul exact du *vertex* est en général impossible ; nous sommes donc amenés à effectuer une approximation en ne sélectionnant que les diagrammes les plus significatifs intervenant dans le développement de $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$. Nous utilisons ici l'approximation la plus simple, appelée approximation de la matrice T . Après avoir obtenu l'expression du *vertex* dans cette approximation, nous présentons et discutons les résultats qu'elle fournit pour le polaron et l'état lié.

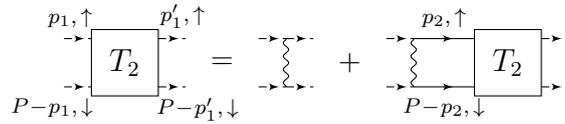
5.2.1 Expression du vertex

Le premier terme du développement de $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ est donné par le diagramme de la figure 4.8-(a). Il décrit un processus d'interaction élémentaire entre l'atome \downarrow et l'atome \uparrow et son expression analytique est simplement g . Cependant, puisque la constante de couplage g de cette interaction tend vers zéro $g \rightarrow 0$ lorsque $k_c \rightarrow \infty$, nous devons répéter ce processus de diffusion une infinité de fois. En effet, chaque terme correspondant à un nombre fini de processus donne une contribution nulle alors que la somme d'une infinité de processus est non nulle, la divergence de la série étant exactement compensée par le fait que $g \rightarrow 0$. L'approximation à l'ordre le plus bas consiste donc à retenir pour $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ la série usuelle des diagrammes en échelle représentée sur la figure 5.2. Nous noterons T_2 la somme de cette série. Comme nous l'avons vu dans la section 4.3.1, cette série de diagrammes fournit l'expression exacte de la matrice T décrivant la diffusion de deux

FIG. 5.2: Le *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ dans l'approximation de la matrice T .

atomes seuls. C'est pourquoi cette première approximation est appelée approximation de la matrice T .

De la même manière que pour le problème à deux corps, l'expression de T_2 peut être obtenue en écrivant une équation de Bethe-Salpeter dont la représentation diagrammatique est donnée par la figure 5.3. Cette équation s'écrit :

FIG. 5.3: Équation de Bethe-Salpeter pour $T_2(P - p_1, p_1; P - p'_1, p'_1)$.

$$T_2(P - p_1, p_1; P - p'_1, p'_1) = g - g \sum_{p_2} G_{0\uparrow}(p_2) G_{0\downarrow}(P - p_2) T_2(P - p_2, p_2; P - p'_1, p'_1), \quad (5.17)$$

où nous avons utilisé les quadrivecteurs $P = (\mathbf{P}, \Omega)$, $p_1 = (\mathbf{p}_1, \omega_1)$ et $p_2 = (\mathbf{p}_2, \omega_2)$. Nous déduisons immédiatement de cette équation que T_2 ne dépend pas de p_1 . En écrivant une équation analogue obtenue en isolant la dernière interaction à la place de la première, nous trouvons que T_2 ne dépend pas non plus de p'_1 . Ainsi, dans cette approximation, le *vertex* est une fonction de l'impulsion totale \mathbf{P} et de la fréquence totale Ω uniquement. Dès lors, dans le membre de droite de l'équation (5.17), nous pouvons sortir T_2 de la somme et calculer l'intégrale sur la fréquence ω_2 . Cette intégrale est effectuée en utilisant la remarque de la section précédente : le contour d'intégration est fermé autour du demi-plan $\text{Re } \omega_2 > 0$. Dans ce demi-plan, $G_{0\downarrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_2, \Omega - \omega_2)$ n'a pas de singularité. En effet, son unique pôle se situe en $\omega_2 = \Omega - E_{\mathbf{P}-\mathbf{p}_2} + E$ dont la partie réelle est négative puisque l'énergie de la quasi-particule E est négative et Ω est sur l'axe imaginaire. La seule contribution provient du pôle de $G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, \omega_2)$, pour $\omega_2 = \omega_{\mathbf{p}_2}$. La contrainte $\text{Re } \omega_{\mathbf{p}_2} > 0$ impose $p_2 > k_F$. En tenant compte du signe $-$ introduit par le sens du contour d'intégration et en remplaçant \mathbf{p}_2 par \mathbf{k} , nous obtenons donc :

$$\sum_{\mathbf{p}_2} \int \frac{d\omega_2}{2i\pi} G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, \omega_2) G_{0\downarrow}(\mathbf{P} - \mathbf{p}_2, \Omega - \omega_2) = - \sum'_{\mathbf{k}} G_{0\downarrow}(\mathbf{P} - \mathbf{k}, \Omega - \omega_{\mathbf{k}}), \quad (5.18)$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} T_2(\mathbf{P}, \Omega)^{-1} &= g^{-1} - \sum'_{\mathbf{k}} G_{0\downarrow}(\mathbf{P} - \mathbf{k}, \Omega - \omega_{\mathbf{k}}) \\ &= \frac{m_r}{2\pi a} - \frac{m_r k_F}{\pi^2} - \sum'_{\mathbf{k}} \left[\frac{2m_r}{k^2} - \frac{1}{\bar{E}_{\mathbf{P},\mathbf{k}}^{(1)} - \Omega} \right], \end{aligned} \quad (5.19)$$

où nous avons utilisé la relation (1.28) permettant d'exprimer la constante de couplage g à l'aide de la longueur de diffusion a et noté $\bar{E}_{\mathbf{p},\mathbf{k}}^{(1)} = |E| + E_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\uparrow}$. La somme peut être calculée analytiquement, la contrainte $k > k_F$ rend le calcul plus complexe que pour le problème à deux corps (cf. équation (4.129)). Nous obtenons :

$$\left[\frac{m_r k_F T_2(\mathbf{P}, \Omega)}{2\pi} \right]^{-1} = \frac{1}{k_F a} - \frac{1}{\pi} - \frac{1}{4\pi \hat{P}} \left((r+1)(A+1) - R' \hat{P}^2 \right) \ln \left(\frac{1+A+R'\hat{P}}{1+A-R'\hat{P}} \right) + \frac{B}{\pi} \left[\arctan \left(\frac{1+R'\hat{P}/2}{B} \right) + \arctan \left(\frac{1-R'\hat{P}/2}{B} \right) - \pi \right], \quad (5.20)$$

où nous avons noté $\hat{P} = P/k_F$, $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$, $R' = 2m_r/m_{\downarrow} = 2/(r+1)$,

$$A = \frac{1}{E_F} \left(\frac{P^2}{2M} + \frac{m_r}{m_{\uparrow}} (|E| - \mu_{\uparrow} - \Omega) \right) \text{ et } B = \frac{1}{k_F} \sqrt{2m_r \left(\frac{P^2}{2M} + |E| - \mu_{\uparrow} - \Omega \right)}. \quad (5.21)$$

Nous pouvons également obtenir l'expression de la fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}$ dans cette approximation. D'après la figure 5.1, elle est obtenue à partir du *vertex* en ajoutant une ligne d'interaction en entrée. Par cohérence avec l'approximation de la matrice T , nous utilisons le propagateur libre $G_{0\downarrow}$ à la place du propagateur exact (représenté par la ligne épaisse). Dès lors, de la même manière que pour la situation dans le vide (cf. équation (5.11)), nous avons :

$$\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{p}_1, \omega_1) = T_2(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1, \omega + \omega_1). \quad (5.22)$$

En effet, puisque le terme de Hartree est nul dans la limite $g \rightarrow 0$, l'équation de Bethe-Salpeter (cf. figure 5.3) montre que T_2 est invariant par ajout d'une ligne d'interaction en entrée.

• **Énergie du polaron.** — L'énergie du polaron est alors donnée par les équations (5.7) et (5.16). Dans l'approximation de la matrice T , nous obtenons :

$$E = E_{\mathbf{p}} + \sum'_{\mathbf{q}} T_2(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}), \quad (5.23)$$

où nous avons évalué en $\omega = 0$ pour tenir compte de la dernière remarque de la section 5.1.5. En utilisant l'expression du *vertex* T_2 donnée par l'équation (5.19) et en remarquant que $\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{(1)} - \omega_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)} = |E| + E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}}$, nous voyons immédiatement [CRLC07] que cette équation est identique à l'équation (2.18) obtenue dans le chapitre 2 en utilisant une seule excitation particule-trou pour la fonction d'onde. Elle fournit donc la même valeur pour l'énergie $E[\mathbf{p}]$ de la quasi-particule polaron. En particulier, le comportement de $E[\mathbf{p}]$ en fonction de \mathbf{p} est donné par la figure 2.1, et la valeur minimale de $E[\mathbf{p}]$ correspondant au potentiel chimique est bien obtenue pour $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Ces deux descriptions équivalentes fournissent donc les mêmes valeurs pour le potentiel chimique et la masse effective du polaron.

• **Énergie de l'état lié.** — L'énergie de l'état lié est donnée par l'équation (5.13) qui s'écrit $[\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, 0; \mathbf{p}_1, 0)]^{-1} = 0$ en tenant compte de la remarque de la section 5.1.5. Dans l'approximation de la matrice T , les équations (5.19) et (5.22) montrent alors que l'énergie de la quasi-particule $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ ne dépend que de l'impulsion totale $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1$ et est donnée par l'équation implicite $[T_2(\mathbf{P}, 0)]^{-1} = 0$ qui s'écrit :

$$\frac{m_r}{2\pi a} = \frac{m_r k_F}{\pi^2} + \sum_{\mathbf{k}}' \left[\frac{2m_r}{k^2} - \frac{1}{\bar{E}_{\mathbf{P}, \mathbf{k}}^{(1)}} \right]. \quad (5.24)$$

Pour $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$ et $1/k_F a = 2$, la variation de $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ en fonction de $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1$ est représentée sur la figure 5.4. Ainsi, la plus petite valeur de E est bien obtenue pour $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 = \mathbf{0}$. Elle correspond au potentiel chimique de l'état lié alors que la pente de la courbe de la figure 5.4 donne la masse effective. Pour ces paramètres, nous obtenons $\mu_{\downarrow} = -8.6182 E_F$ et $m^* = 2.08 m_{\downarrow}$. Remarquons à nouveau une caractéristique importante de $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ visible sur la figure 5.4 : le comportement quadratique en fonction de l'impulsion totale \mathbf{P} ne se limite pas qu'aux petites valeurs de P . Plus précisément, le calcul de la pente de la droite reliant les deux points correspondant à $P = 0$ et $P = k_F$ donne une masse effective de $2.074 m_{\downarrow}$, alors que l'extrapolation à petit P donne $2.077 m_{\downarrow}$. Nous utiliserons cette propriété en calculant la masse effective à partir de la valeur de $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ pour $P = 0.3 k_F$ (et $P = 0.1 k_F$ pour contrôle) et éviterons ainsi les erreurs liées à la précision numérique.

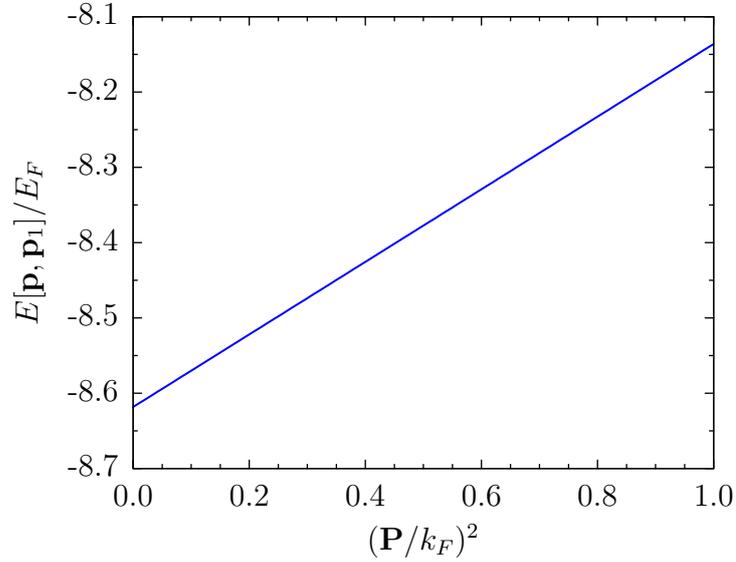


FIG. 5.4: Énergie de l'état lié en fonction du carré de l'impulsion totale $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1$ lorsque $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$ et $1/k_F a = 2$.

Pour $\mathbf{P} = \mathbf{0}$ et $\Omega = 0$, l'expression de T_2 est simple, l'équation (5.19) donne, lorsque $|\mu_{\downarrow}| > \mu_{\uparrow}$:

$$\left[\frac{m_r T_2(\mathbf{0}, 0)}{2\pi a} \right]^{-1} = 1 - \frac{2k_F a}{\pi} [1 + \eta \arctan \eta], \quad (5.25)$$

où nous avons noté $\eta = \sqrt{2m_r(|\mu_\downarrow| - \mu_\uparrow)}/k_F = \sqrt{(\rho - 1)m_r/m_\uparrow}$ et $\rho = |\mu_\downarrow|/E_F$. Le potentiel chimique de l'état lié est donc donné par l'équation transcendante simple :

$$\frac{\pi}{2k_F a} = 1 + \eta \arctan \eta. \quad (5.26)$$

Cette équation a été obtenue ultérieurement par Mora et Chevy [MC09] et Punk *et al.* [PDZ09] en utilisant un ansatz variationnel pour la fonction d'onde dans un modèle à deux canaux. Lorsque le dimère et la mer de Fermi d'atomes \uparrow ne sont pas couplés, la fonction d'onde considérée s'écrit :

$$|\psi\rangle = \beta_0 d_0^\dagger |0\rangle + \sum_{\mathbf{k}}' \beta_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle, \quad (5.27)$$

où, comme dans le chapitre 2, $|0\rangle = \prod_{k < k_F} c_{\mathbf{k}}^\dagger |vac\rangle$ est la mer de Fermi d'atomes \uparrow , $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ l'opérateur de création d'un fermion \uparrow , $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ l'opérateur de création d'un fermion \downarrow et le nouvel opérateur bosonique $d_{\mathbf{P}}^\dagger$ correspond à la création d'un dimère d'impulsion totale \mathbf{P} . Il existe donc, comme pour le polaron, deux descriptions équivalentes de l'état lié.

5.2.2 Résultats

La résolution numérique de l'équation (5.26) ne pose aucune difficulté. Nous représentons sur la figure 5.5 la valeur du potentiel chimique du polaron (cf. figure 2.2) et de l'état lié pour des masses égales $m_\downarrow = m_\uparrow$. Naturellement, nous trouvons que le polaron

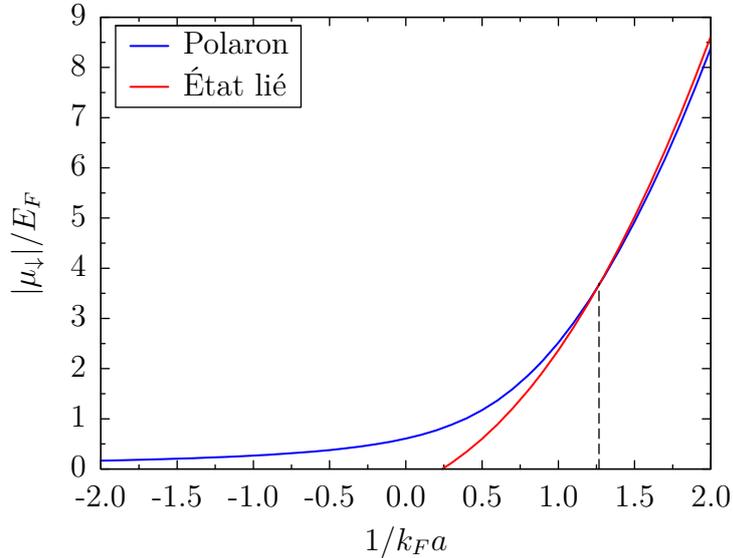


FIG. 5.5: Potentiel chimique du polaron et de l'état lié dans l'approximation de la matrice T en fonction de $1/k_F a$ lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow$. La ligne en tirets indique la valeur critique de l'interaction correspondant à l'apparition de l'état lié $1/(k_F a)_c = 1.27$.

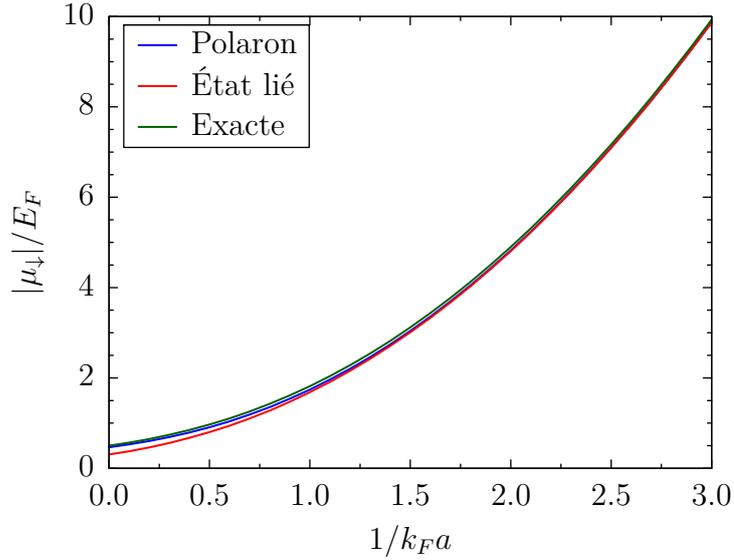


FIG. 5.6: Comparaison du potentiel chimique du polaron et de l'état lié dans l'approximation de la matrice T avec la valeur exacte (cf. équation (2.35)), en fonction de $1/k_F a$ lorsque $m_\downarrow = \infty$.

est la quasi-particule de plus faible énergie du côté BCS, alors que du côté BEC, c'est l'état lié. En effet, il est facile de voir que l'équation (5.24) donnant l'énergie de l'état lié, n'a pas de solution lorsque $a < 0$ puisque son membre de droite est positif. Plus précisément, nous pouvons déterminer la valeur critique de $1/k_F a$ à partir de laquelle l'état lié est énergétiquement favorisé : c'est le point d'intersection des deux courbes qui se situe à $1/(k_F a)_c = 1.27$ dans cette approximation. Remarquons que l'angle de croisement des deux courbes est très faible, ce qui rend la valeur critique $1/(k_F a)_c$ très sensible à de petites modifications du potentiel chimique. La situation est encore plus marquée lorsque l'impureté a une masse infinie $m_\downarrow = \infty$ comme nous pouvons le voir sur la figure 5.6. Nous nous limitons ici au côté BEC $a > 0$ (puisque nous avons déjà considéré le côté BCS dans le chapitre 2) et comparons avec la valeur exacte (2.35). L'accord est à nouveau très bon puisqu'on distingue difficilement les 3 courbes sur cette figure. Cependant, nous trouvons que dans cette approximation, la courbe du polaron est toujours au-dessus de celle de l'état lié, correspondant à une valeur critique de l'interaction pour l'apparition de l'état lié rejetée à l'infini $1/(k_F a)_c = +\infty$. Rappelons que la valeur exacte du potentiel chimique ne présente aucune singularité en fonction de $1/k_F a$ et qu'elle est obtenue en écrivant explicitement l'existence de l'état lié dès que a est positive. Nous nous attendons donc naturellement à $1/(k_F a)_c = 0$ lorsque $m_\downarrow = +\infty$.

Plus précisément, nous représentons sur la figure 5.7 la valeur de $1/(k_F a)_c$ dans l'approximation de la matrice T en fonction du rapport des masses $r = m_\downarrow/m_\uparrow$. Ainsi, lorsque l'impureté devient de plus en plus lourde $m_\downarrow \rightarrow \infty$, nous avons effectivement $1/(k_F a)_c \rightarrow +\infty$, en contradiction avec le calcul exact. Dans l'autre limite $m_\downarrow \rightarrow 0$, nous observons également que $1/(k_F a)_c \rightarrow +\infty$. Nous verrons plus loin que, dans ce dernier cas, ce comportement qualitatif persiste à un ordre plus élevé.

Enfin, nous pouvons calculer la masse effective des deux quasi-particules dans cette

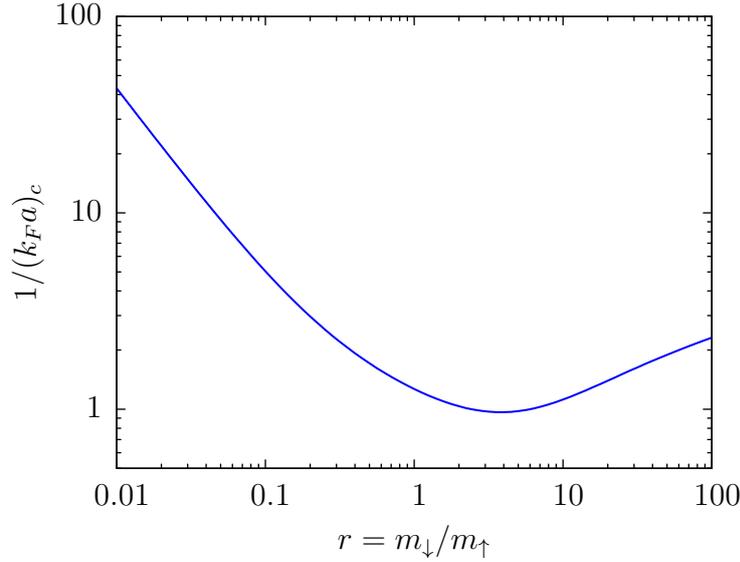


FIG. 5.7: Valeur critique de l'interaction correspondant à l'apparition de l'état lié en fonction du rapport des masses $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$ dans l'approximation de la matrice T .

approximation. Nous voyons sur la figure 5.8 correspondant à la situation avec des masses égales $m_{\downarrow} = m_{\uparrow} = m$, que dans la limite BEC, la masse effective de l'état lié tend, comme attendu, vers la masse totale $M = 2m$. Lorsque nous nous éloignons de la limite BEC, la masse effective de l'état lié augmente. Cela est physiquement raisonnable puisqu'il y a alors de plus en plus d'atomes \uparrow qui "habillent" l'état lié. La situation est analogue à celle du polaron où, lorsqu'on augmente l'interaction, l'unique atome \downarrow est "habillé" par de plus en plus d'atomes \uparrow . Nous trouvons dans cette approximation que la masse effective est discontinue à la transition passant de $m^* \sim 4.4m$ pour le polaron à $m^* \sim 2.2m$ pour l'état lié. Remarquons également une autre propriété qui est valable à la fois pour le polaron et l'état lié : lorsque nous calculons la masse effective au-delà de la transition, celle-ci devient négative. Cela signifie que l'énergie de la quasi-particule n'est plus minimale pour $\mathbf{P} = \mathbf{0}$ et témoigne d'une instabilité. Notons que la transition polaron-état lié se situe avant cette instabilité : la masse effective devient négative lorsque $1/k_F a > 1.71$ pour le polaron et $1/k_F a < 0.16$ pour l'état lié, alors que la transition se situe à $1/(k_F a)_c = 1.27$.

Nous représentons enfin sur la figure 5.9 le potentiel chimique et la masse effective de l'état lié en fonction du rapport des masses $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$. Le comportement qualitatif est alors très bien décrit par l'énergie et la masse du dimère $\downarrow\text{-}\uparrow$ seul. Remarquons également que la variation de la masse effective est plus importante que pour le polaron (cf. figure 2.4).

5.2.3 Limite BEC

Nous nous intéressons ici à la valeur du potentiel chimique de l'état lié μ_{\downarrow} dans la limite BEC, $1/k_F a \rightarrow \infty$. Comme nous l'avons vu précédemment, dans l'approximation

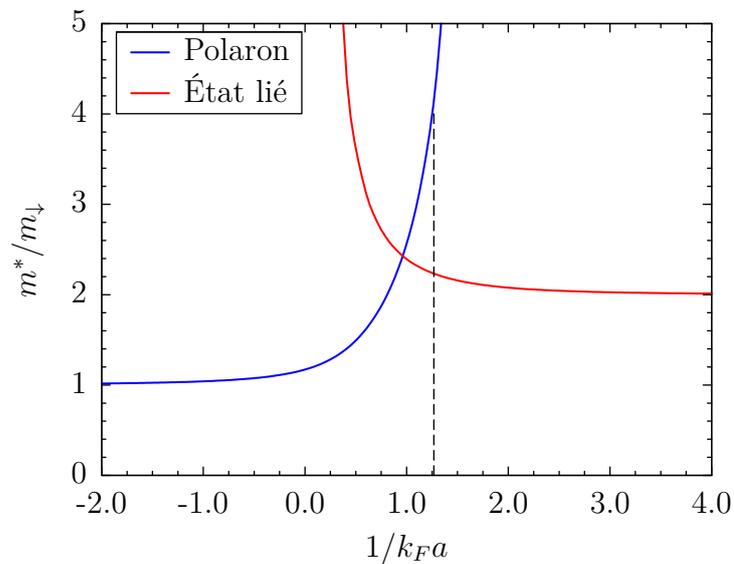


FIG. 5.8: Masse effective du polaron et de l'état lié dans l'approximation de la matrice T en fonction de $1/k_F a$ lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow$. La ligne en tirets indique la valeur critique de l'interaction correspondant à l'apparition de l'état lié $1/(k_F a)_c = 1.27$.

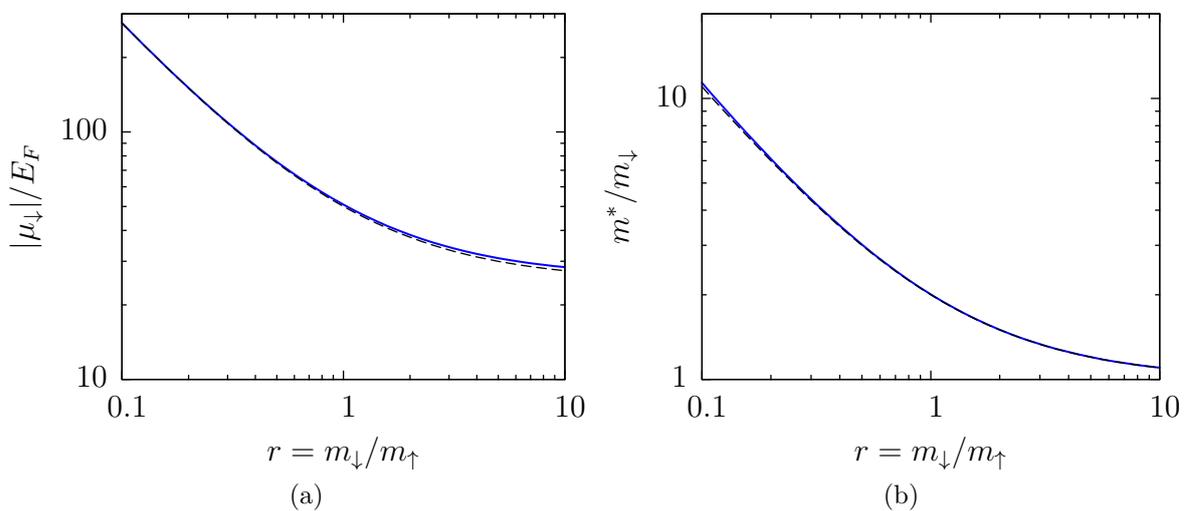


FIG. 5.9: Potentiel chimique (a) et masse effective (b) de l'état lié dans l'approximation de la matrice T en fonction du rapport des masses $r = m_\downarrow/m_\uparrow$ lorsque $1/k_F a = 5$. Les courbes en tirets correspondent respectivement à l'énergie de liaison du dimère $\downarrow\uparrow$ ϵ_b et à la masse du dimère $M = m_\downarrow + m_\uparrow$.

de la matrice T nous obtenons une équation transcendante simple (cf. équation (5.26)) pour $\eta = \sqrt{2m_r(|\mu_\downarrow| - \mu_\uparrow)}/k_F$. Par itérations successives de cette équation, il est alors facile d'obtenir un développement asymptotique de η à n'importe quel ordre en $k_F a$. À l'ordre 2, nous trouvons par exemple :

$$\eta = \frac{1}{k_F a} - \frac{2}{3\pi}(k_F a)^2 + o(k_F a)^2, \quad (5.28)$$

et nous en déduisons la valeur du potentiel chimique de l'état lié :

$$\mu_\downarrow = -\epsilon_b - E_F + g_{ad}n_\uparrow + o(k_F a), \quad (5.29)$$

où le terme dominant est $\epsilon_b = 1/2m_r a^2$, l'énergie de liaison du dimère $\downarrow\uparrow$. Le terme d'ordre 0 est l'énergie de Fermi $E_F = \mu_\uparrow$. Il est physiquement raisonnable car un atome \uparrow a été transféré du niveau de Fermi vers l'état lié. Le dernier terme, d'ordre 1 en a , décrit, au niveau champ moyen, la répulsion entre le dimère formé et la mer de Fermi. Il fait intervenir naturellement la densité n_\uparrow d'atomes \uparrow , et la constante de couplage g_{ad} . Cette constante de couplage peut être reliée à la longueur de diffusion atome-dimère, que nous avons déjà considérée dans la section 4.3.2, par la relation :

$$g_{ad} = \frac{2\pi}{m_r^T} a_3, \quad (5.30)$$

où $m_r^T = m_\uparrow M/(m_\uparrow + M)$ est la masse réduite du système atome-dimère et $M = m_\uparrow + m_\downarrow$ la masse totale. Le développement (5.28) obtenu dans l'approximation de la matrice T donne $g_{ad} = 4\pi a/m_r$, c'est-à-dire $a_3/a = 2m_r^T/m_r = 2/R$ avec $R = m_r/m_r^T$, qui est la valeur de la longueur de diffusion atome-dimère a_3^B obtenue dans l'approximation de Born (cf. équation (4.135)). En particulier, pour des masses égales $m_\downarrow = m_\uparrow$, nous avons $a_3^B = 8/3 a$ alors que la valeur exacte est $a_3 = 1.18 a$. Ainsi, l'approximation de la matrice T ne décrit pas de manière exacte la limite BEC jusqu'à l'ordre 1 en $k_F a$.

Remarquons que pour le polaron, dans la limite BEC, nous avons obtenu en utilisant une seule excitation particule-trou un développement asymptotique analogue à (5.29) (cf. équation (2.25)), la seule différence est le terme d'ordre 0 : nous avons trouvé $k_F^2/2M - E_F$. Nous pouvons désormais comprendre cette valeur. Dans la limite BEC, la contribution principale provient du terme correspondant à deux excitations particule-trou :

$$\sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}} |0\rangle. \quad (5.31)$$

À l'ordre dominant et à \mathbf{q} fixé, cette expression décrit la formation d'un dimère $\downarrow\uparrow$ d'impulsion totale \mathbf{q} (correspondant à $b_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger$) et d'un trou d'impulsion \mathbf{q} dans la mer de Fermi d'atomes \uparrow , son énergie est donc $-\epsilon_b + q^2/2M - q^2/2m_\uparrow$. Cette énergie est minimale lorsque $q = k_F$. Nous déduisons ainsi que le poids $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ doit être une fonction piquée autour de $q = k_F$ et nous avons vérifié numériquement qu'il en est bien ainsi. L'énergie du polaron à l'ordre dominant est donc $-\epsilon_b + k_F^2/2M - E_F$. Cet écart entre les deux potentiels chimiques dans la limite BEC peut effectivement être observé sur les figures 5.5 et 5.6. Il vaut alors respectivement $E_F/2$ lorsque les masses sont égales

et 0 lorsque $m_{\downarrow} = \infty$. Remarquons enfin que les termes d'ordre 1 en $k_F a$ décrivant l'interaction au niveau champ moyen sont, quant à eux, identiques pour le polaron et l'état lié dans cette approximation.

5.2.4 Un traitement auto-cohérent

Pour améliorer l'approximation de la matrice T , une approche naturelle souvent utilisée consiste à remplacer les propagateurs libres $G_{0\downarrow}$ par des propagateurs exacts G_{\downarrow} dans la *vertex* d'interaction donné par la somme des diagrammes de la figure 5.3. De cette manière, nous resomons une infinité de diagrammes d'ordre plus élevé. Ce traitement auto-cohérent a par exemple été effectué [HRCZ07] pour le calcul du paramètre universel ξ donnant le potentiel chimique d'un gaz de fermions à $T = 0$ non polarisé $n_{\downarrow} = n_{\uparrow}$ (cf. section 1.3). Il fournit $\xi = 0.36$ alors que le résultat de l'approximation de la matrice T est $\xi = 0.455$ [PPS04].

Comme pour l'approximation de la matrice T , nous pouvons écrire une équation de Bethe-Salpeter analogue à l'équation (5.17); nous devons simplement remplacer $G_{0\downarrow}$ par G_{\downarrow} . Pour une fréquence totale Ω sur l'axe imaginaire, le *vertex* s'écrit alors :

$$\Gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{P}, \Omega)^{-1} = \frac{m_r}{2\pi a} - \frac{m_r k_F}{\pi^2} - \sum_{\mathbf{k}}' \left[\frac{2m_r}{k^2} + G_{\downarrow}(\mathbf{P} - \mathbf{k}, \Omega - \omega_{\mathbf{k}}) \right]. \quad (5.32)$$

Cette expression fait intervenir la fonction de Green exacte $G_{\downarrow}(\mathbf{p}, \omega)$ pour des fréquences ω dans le demi-plan $\text{Re } \omega \leq 0$. L'équation de Dyson (5.3) relie cette fonction de Green à la self-énergie Σ . À nouveau, la fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}$ coïncide avec le *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ et l'équation (5.16) s'écrit :

$$\Sigma(\mathbf{p}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}}' \Gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega + \omega_{\mathbf{q}}). \quad (5.33)$$

Cette équation est valable a priori pour ω sur l'axe imaginaire. Cependant, comme le membre de droite définit une fonction analytique dans les deux demi-plans $\text{Im } \omega > 0$ et $\text{Im } \omega < 0$, nous en déduisons que c'est le prolongement analytique de Σ au plan complexe des fréquences. L'équation (5.33) est donc valable pour ω quelconque. Si $\text{Re } \omega \leq 0$, nous pouvons l'écrire :

$$\Sigma(\mathbf{p}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}}' \int \frac{d\omega_1}{2i\pi} e^{\omega_1 0^+} \Gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega_1) G_{0\uparrow}(\mathbf{q}, \omega_1 - \omega), \quad (5.34)$$

où l'intégrale sur ω_1 a lieu sur l'axe imaginaire. En effet, en fermant le contour d'intégration autour du demi-plan $\text{Re } \omega_1 < 0$, l'unique pôle est $\omega_1 = \omega + \omega_{\mathbf{q}}$ (qui est bien situé dans le demi-plan $\text{Re } \omega_1 < 0$ car $\text{Re } \omega \leq 0$ et $q < k_F$) et nous obtenons simplement $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega + \omega_{\mathbf{q}})$. Ainsi, la self-énergie $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ pour $\text{Re } \omega \leq 0$ s'exprime à l'aide des valeurs du *vertex* sur l'axe imaginaire des fréquences. Les équations (5.32) et (5.34) forment un système d'équations couplées pour la fonction inconnue $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$. Sa résolution numérique est plus complexe, nous pouvons alors obtenir par exemple le potentiel chimique du polaron $\mu_{\downarrow} = \Sigma(\mathbf{0}, 0)$.

À l'unitarité, pour des masses égales $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$, nous trouvons $\mu_{\downarrow} = -0.6773 E_F$, alors que l'approximation de la matrice T donne $\mu_{\downarrow} = -0.6066 E_F$ et que le résultat exact

est $\mu_{\downarrow} = -0.6156 E_F$ (le dernier chiffre pouvant éventuellement différer d'une unité), comme nous l'avons montré dans le chapitre 2. Ce résultat est donc moins bon que le traitement non auto-cohérent et cela peut être compris à l'aide de notre étude du chapitre 2. En effet, nous avons vu que pour la solution exacte, la plupart des diagrammes se compensent exactement par un phénomène d'interférences. Le traitement auto-cohérent détruit naturellement cet équilibre, puisqu'à un ordre donné, il ne retient que certains diagrammes. Ainsi, un traitement auto-cohérent ne conduit pas de manière systématique à une amélioration du résultat. Notons enfin que cette difficulté se manifeste également dans les calculs de type Monte-Carlo Diagrammatique effectués par Prokof'ev et Svistunov [PS08a]. En effet, la plupart des séries qui apparaissent sont alors divergentes et ils ont dû utiliser des techniques de resommation.

5.3 Généralisation à deux paires particule-trou

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, l'approximation de la matrice T revient à retenir uniquement les diagrammes où il n'y a qu'une seule ligne de propagateurs d'atomes \uparrow . Elle est équivalente à restreindre l'espace de Hilbert des états excités du système à une paire particule-trou. Nous pouvons simplement améliorer cette approximation en sélectionnant les diagrammes pour lesquels il y a au plus deux lignes de propagateurs explicites d'atomes \uparrow . Nous montrerons que pour le polaron, cette généralisation est équivalente au calcul réalisé dans le chapitre 2 avec deux paires particule-trou et fournit ainsi une solution essentiellement exacte. De la même manière, pour l'état lié, l'accord avec les calculs Monte-Carlo ou avec les résultats analytiques lorsque ceux-ci sont disponibles, est excellent. Naturellement, ce traitement peut être généralisé avec 3, 4, ... lignes de propagateurs explicites, mais nous montrerons à la fin de cette section que cette série d'approximations successives converge très rapidement vers la solution exacte, si bien qu'en pratique il est inutile d'effectuer le calcul au-delà de 2 lignes de propagateurs.

5.3.1 Expression du vertex

Comme nous l'avons déjà vu, les énergies du polaron et de l'état lié sont obtenues à partir de la connaissance de la fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, 0; \mathbf{p}_1, \omega_1)$. Ainsi, nous noterons dans toute cette section $p = (\mathbf{p}, 0)$. À l'aide de la figure 5.1, nous voyons que cette fonction s'exprime à l'aide du *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p + p'_1 - p_1, p_1; p, p'_1)$ décrivant l'interaction entre un fermion \uparrow de quadrivecteur p_1 en entrée et p'_1 en sortie, et un fermion \downarrow de quadrivecteur $p + p'_1 - p_1$ en entrée et p en sortie. Ainsi, par conservation de l'impulsion totale, $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ ne dépend que de trois quadrivecteurs : pour alléger l'écriture, nous le noterons simplement $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1)$. De plus, nous n'indiquerons plus le quadrivecteur correspondant sur les diagrammes que nous allons dessiner, celui-ci pouvant être rétabli immédiatement par conservation de l'impulsion totale. Nous allons donc écrire une équation pour ce *vertex* en ne sélectionnant que les diagrammes avec au plus deux lignes de propagateurs explicites d'atomes \uparrow . Précisons ici le sens du terme explicite : il s'agit de propagateurs qui apparaissent explicitement dans les diagrammes (et dans les équations) que nous allons

dessiner. Par opposition, si nous développons ces mêmes équations auto-cohérentes et dessinons tous les diagrammes élémentaires qui y contribuent, nous avons alors généralement plus de 2 lignes de propagateurs (et même une infinité) : nous les appellerons propagateurs implicites. Le premier terme du développement de $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ est donné par le diagramme de la figure 4.8-(a) ; il décrit un processus d'interaction élémentaire entre l'atome \downarrow et l'atome \uparrow . Cependant, comme pour l'approximation de la matrice T , nous devons tenir compte des processus où cette interaction se répète une infinité de fois, les autres termes donnant une contribution nulle pour $g \rightarrow 0$. Nous obtenons donc naturellement un terme $T_2(p + p'_1)$. Puisque désormais deux fermions \uparrow peuvent interagir avec l'atome \downarrow , nous avons également la possibilité que la première interaction de l'atome \downarrow se fasse avec un autre fermion \uparrow de quadrivecteur p_2 . Nous appelons $T_3(p_1, p_2; p, p'_1, p'_2)$ le *vertex* représenté sur la figure 5.10-(b) et décrivant l'interaction entre un atome \downarrow et deux atomes \uparrow , la première interaction ayant lieu avec un atome \uparrow de quadrivecteur p_2 .

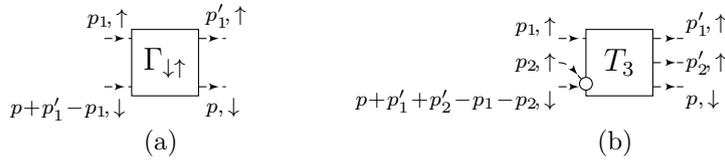


FIG. 5.10: Représentation du *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1)$ et du *vertex* $T_3(p_1, p_2; p, p'_1, p'_2)$ décrivant l'interaction entre un atome \downarrow et deux atomes \uparrow , la première interaction ayant lieu avec un atome \uparrow de quadrivecteur p_2 .

Puisque p_2 est une variable interne correspondant à un autre fermion \uparrow , nous devons fermer le diagramme à l'aide d'un propagateur $G_{0\uparrow}(p_2)$ et sommer sur p_2 pour obtenir la contribution au *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$: c'est le troisième diagramme du membre de droite de la figure 5.11. Enfin, après une interaction répétée avec l'atome \uparrow de quadrivecteur p_1 décrit par $T_2(p + p'_1)$, l'atome \downarrow peut interagir avec un autre atome \uparrow de quadrivecteur p_2 , ce processus étant décrit par le *vertex* T_3 et représenté par le deuxième diagramme du membre de droite de la figure 5.11.

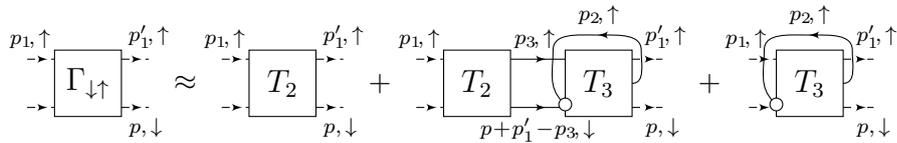
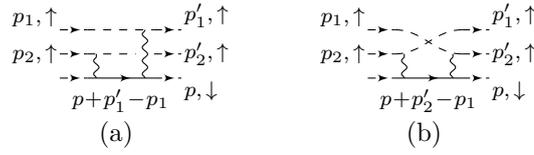


FIG. 5.11: Le *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ obtenu en ne retenant que les diagrammes avec au plus deux lignes de propagateurs explicites d'atomes \uparrow .

Pour fixer le signe de T_3 (qui est purement conventionnel), considérons les deux diagrammes à l'ordre 2 en g intervenant dans T_3 et représentés sur la figure 5.12. En utilisant les règles de Feynman (cf. section 4.2.3), nous obtenons l'expression analytique correspondant au diagramme (a) :

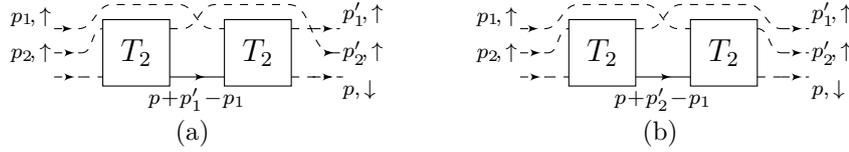
$$-(-g)^2 G_{0\downarrow}(p + p'_1 - p_1) = -g^2 G_{0\downarrow}(p + p'_1 - p_1). \quad (5.35)$$

FIG. 5.12: Contributions à l'ordre 2 au *vertex* $T_3(p_1, p_2; p, p'_1, p'_2)$.

Nous avons le facteur $(-g)^2$ car le diagramme est d'ordre 2 et le signe $-$ car la ligne issue de p_1 se termine en p'_1 et celle issue de p_2 se termine en p'_2 . De la même manière, l'expression analytique correspondant au diagramme (b) est :

$$(-g)^2 G_{0\downarrow}(p + p'_2 - p_1) = g^2 G_{0\downarrow}(p + p'_2 - p_1), \quad (5.36)$$

où le signe est cette fois $+$, car il y a échange des deux fermions \uparrow : la ligne issue de p_1 se termine en p'_2 et celle issue de p_2 se termine en p'_1 . Remarquons cependant que ces deux diagrammes sont nuls dans la limite $g \rightarrow 0$. Pour obtenir une contribution non nulle, nous devons donc à nouveau tenir compte d'une interaction répétée entre chaque atome \uparrow et l'atome \downarrow . Les diagrammes à l'ordre le plus bas en T_2 intervenant dans T_3 sont donc les deux diagrammes de la figure 5.13 correspondant respectivement à $-T_2(p + p'_1 + p'_2 - p_1)G_{0\downarrow}(p + p'_1 - p_1)T_2(p + p'_1)$ et $T_2(p + p'_1 + p'_2 - p_1)G_{0\downarrow}(p + p'_2 - p_1)T_2(p + p'_2)$.

FIG. 5.13: Contributions à l'ordre le plus bas en T_2 au *vertex* $T_3(p_1, p_2; p, p'_1, p'_2)$.

Les règles de Feynman nous permettent alors d'obtenir l'équation correspondant à la figure 5.11 :

$$\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1) = T_2(p + p'_1) \left[1 + \sum_{p_2, p_3} G_{0\uparrow}(p_3) G_{0\downarrow}(p + p'_1 - p_3) G_{0\uparrow}(p_2) T_3(p_3, p_2; p, p'_1, p_2) \right] - \sum_{p_2} G_{0\uparrow}(p_2) T_3(p_1, p_2; p, p'_1, p_2). \quad (5.37)$$

Chacun de ces termes résulte de la simple lecture des diagrammes. Précisons cependant comment nous obtenons leur signe. Le premier terme correspond au *vertex* de l'approximation de la matrice T , son expression est donc $T_2(p + p'_1)$. Pour le troisième terme, le signe $-$ provient de la boucle de fermions \uparrow supplémentaire résultant de la fermeture du diagramme par le propagateur $G_{0\uparrow}(p_2)$. Enfin, le deuxième terme est simplement la succession des deux *vertex* précédents. Cependant, comme nous l'avons vu dans le chapitre 4, pour le calcul d'un *vertex*, il y a un signe $-$ supplémentaire lorsque la ligne issue de p_1 se termine en p'_1 . Comme ce signe $-$ est inclus dans la définition de T_2 et de T_3 , le produit des expressions correspondant au premier et troisième diagramme revient à

attribuer le signe $(-1)^2 = +1$, alors que la ligne issue de p_1 se termine en p'_1 : nous devons donc rajouter un signe $-$ supplémentaire. Enfin, ce signe $-$ provenant de l'expression du troisième diagramme pour donner le signe $+$ qui apparaît dans l'équation (5.37).

Nous devons désormais écrire une équation pour le *vertex* $T_3(p_1, p_2; p, p'_1, p'_2)$ dans le cadre de notre approximation, c'est-à-dire en sélectionnant les diagrammes avec au plus deux lignes de propagateurs explicites d'atomes \uparrow . Par définition de T_3 , la première interaction de l'atome \downarrow a lieu avec l'atome \uparrow de quadrivecteur p_2 . Cependant, comme $g \rightarrow 0$, pour obtenir une contribution non nulle, nous devons avoir une interaction répétée entre ces deux atomes donnant un facteur commun $-T_2(p + p'_1 + p'_2 - p_1)$ (la multiplication par -1 permet d'éliminer le signe $-$ qui est inclus dans la définition du *vertex* T_2 et attribue ainsi le bon signe $-g$ au diagramme décrivant une interaction élémentaire). Après ce processus, l'atome \downarrow peut interagir à nouveau avec les deux atomes \uparrow . Cependant, la première interaction doit cette fois-ci avoir lieu avec l'atome \uparrow de quadrivecteur p_1 . Sinon nous aurions une interaction répétée T_2 suivie d'une interaction élémentaire $-g$ avec le même atome \uparrow , et, d'après l'équation de Bethe-Salpeter pour le *vertex* T_2 , ceci redonne exactement T_2 . La première possibilité est donc décrite par le premier diagramme de la

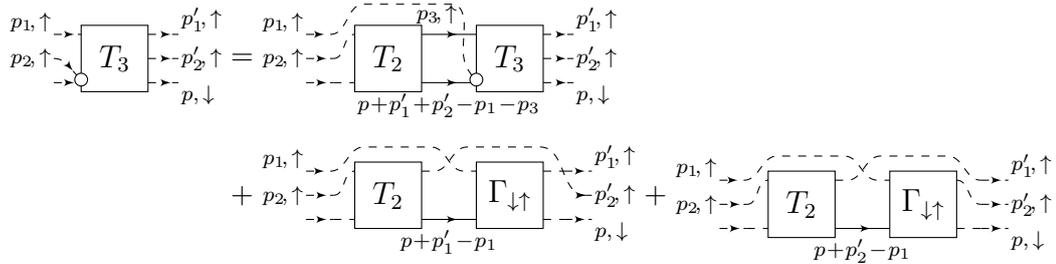


FIG. 5.14: Expression du *vertex* T_3 obtenue en ne retenant que les diagrammes avec au plus deux lignes de propagateurs explicites d'atomes \uparrow .

figure 5.14 qui fournit un terme $-T_3(p_3, p_1; p, p'_1, p'_2)$, le signe $-$ provenant de l'échange des deux lignes de fermions \uparrow . Les deux autres possibilités correspondent à la situation où, après son interaction répétée avec l'atome \downarrow , l'atome \uparrow est libéré avec le quadrivecteur p'_1 ou p'_2 . Les seuls processus possibles sont alors une interaction entre l'atome \downarrow et l'autre atome \uparrow de quadrivecteur p_1 , l'atome \uparrow ayant après cette interaction le quadrivecteur p'_2 ou p'_1 . Ces processus sont décrits respectivement par les *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1)$ et $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_2)$, et sont représentés par les deux derniers diagrammes de la figure 5.14. Nous obtenons ainsi l'équation :

$$\begin{aligned}
T_3(p_1, p_2; p, p'_1, p'_2) &= -T_2(p + p'_1 + p'_2 - p_1) \\
&\times \left[- \sum_{p_3} G_{0\uparrow}(p_3) G_{0\downarrow}(p + p'_1 + p'_2 - p_1 - p_3) T_3(p_3, p_1; p, p'_1, p'_2) \right. \\
&\quad \left. + G_{0\downarrow}(p + p'_1 - p_1) \Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1) - G_{0\downarrow}(p + p'_2 - p_1) \Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_2) \right].
\end{aligned} \tag{5.38}$$

À nouveau, le signe $-$ pour le troisième terme provient de l'échange des deux lignes de

fermions (la ligne issue de p_2 se termine en p'_1). Nous pouvons le vérifier de la manière suivante : si nous remplaçons le *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ par T_2 (son expression à l'ordre le plus bas) dans les deux derniers diagrammes de la figure 5.14, nous obtenons naturellement les deux diagrammes de la figure 5.13. En effectuant la même substitution dans l'équation (5.38), nous devons donc retrouver les deux expressions données juste au-dessus de la figure 5.13. Une conséquence importante de cette équation est que le *vertex* T_3 ne dépend pas du quadrivecteur p_2 . En effet, cette variable n'apparaît pas dans le membre de droite. Cela résulte simplement de la présence du *vertex* T_2 en entrée des différents diagrammes de la figure 5.14 qui ne dépend que de la somme des quadrivecteurs $p + p'_1 + p'_2 - p_1$. Ainsi, nous le noterons désormais $T_3(p_1; p, p'_1, p'_2)$.

Puisque nous nous limitons à seulement deux lignes de propagateurs \uparrow , les équations (5.37) et (5.38) constituent un système fermé et nous n'avons pas besoin de considérer des *vertex* d'ordre plus élevé. Nous allons maintenant préciser l'expression de la fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1)$ dans cette approximation. D'après la figure 5.1, elle est obtenue à partir du *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ en ajoutant une interaction élémentaire, un propagateur libre $G_{0\uparrow}$ et un propagateur exact G_{\downarrow} en entrée. Cependant, nous avons vu dans la section 5.2.4 que ce traitement auto-cohérent se révèle être inutile. Nous utiliserons donc un propagateur libre $G_{0\downarrow}$ et la relation s'écrit :

$$\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1) = -g \sum_{p_3} G_{0\uparrow}(p_3) G_{0\downarrow}(p + p_1 - p_3) \Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_3; p, p_1). \quad (5.39)$$

Une étude plus approfondie des équations (5.37) et (5.38) donnant $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ dans notre approximation, montre qu'en fait, nous prenons en compte plus de diagrammes élémentaires que nous pouvons le penser à première vue. Plus précisément, nos équations reviennent à utiliser à la place de $G_{0\downarrow}$ dans l'équation (5.39) le propagateur complet $G_{\downarrow}^{(1)} = G_{0\downarrow} + G_{0\downarrow} \Sigma_{\downarrow}^{(1)} G_{\downarrow}^{(1)}$, où $\Sigma_{\downarrow}^{(1)}$ est la self-énergie dans l'approximation de la matrice T . La preuve détaillée est technique, nous donnons néanmoins les idées principales par souci d'exhaustivité. Le *vertex* d'interaction donné par les équations couplées (5.37) et (5.38) n'est pas exactement le *vertex* défini dans le chapitre 4. En effet, cela peut être vu par exemple sur les diagrammes à l'ordre 2 en T_2 contribuant à $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ et représentés sur la figure 5.15. Ces deux diagrammes sont obtenus en remplaçant T_3 par les deux dia-

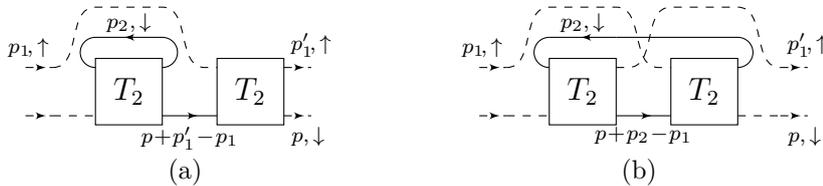


FIG. 5.15: Contributions à l'ordre 2 en T_2 au *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1)$.

grammes de la figure 5.13 dans le dernier terme de la figure 5.11. Le diagramme 5.15-(b) est un diagramme irréductible et contribue au *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ que nous avons défini dans le chapitre 4. Par contre, le diagramme 5.15-(a) est obtenu en insérant en entrée du *vertex* T_2 une self-énergie $\Sigma_{\downarrow}^{(1)}$ dans l'approximation de la matrice T . Il ne devrait donc pas intervenir dans le *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$, puisque nous avons regroupé ces insertions de self-énergies

en remplaçant les propagateurs libres des pattes externes de la fonction de Green à deux particules par des propagateurs exacts (cf. équation (4.115)). En fait, il est facile de vérifier que le diagramme 5.15-(b) est le seul diagramme d'ordre 2 en T_2 contribuant au *vertex* $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ défini dans le chapitre 4. En effet, la seule autre possibilité serait d'avoir une succession de deux *vertex* T_2 , mais cela revient simplement à resommer plusieurs fois les diagrammes contribuant à T_2 . De manière générale, en itérant les équations correspondant aux figures 5.11 et 5.14, nous voyons que $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ possède en entrée un nombre arbitraire d'insertions de self-énergies $\Sigma_{\downarrow}^{(1)}$ dans l'approximation de la matrice T . Ainsi, après multiplication par le propagateur libre $G_{0\downarrow}$ de l'équation (5.39), nous avons en fait $G_{0\downarrow} + G_{0\downarrow}\Sigma_{\downarrow}^{(1)}G_{0\downarrow} + G_{0\downarrow}\Sigma_{\downarrow}^{(1)}G_{0\downarrow}\Sigma_{\downarrow}^{(1)}G_{0\downarrow} + \dots$, qui est, d'après l'équation de Dyson (cf. équation (4.104)), le propagateur complet $G_{\downarrow}^{(1)}$ dans l'approximation de la matrice T .

Revenons maintenant au calcul de la fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}$. Pour obtenir son expression, nous devons simplement rajouter une ligne d'interaction en entrée des diagrammes de la figure 5.11. Puisque T_2 est invariant par ajout d'une ligne d'interaction, nous obtenons immédiatement que les deux premiers diagrammes contribuant à $\gamma_{\downarrow\uparrow}$ sont exactement ceux de la figure 5.11 (nous devons uniquement remplacer p'_1 par p_1 d'après l'équation (5.39)). Le troisième terme de la figure 5.11 donne le diagramme de la figure 5.16

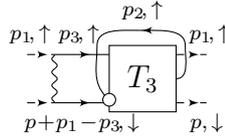


FIG. 5.16: Le troisième terme intervenant dans la fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1)$ obtenue à partir du *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$ (c.f. figure 5.11) en ajoutant une ligne d'interaction en entrée.

pour $\gamma_{\downarrow\uparrow}$, qui correspond à :

$$g \sum_{p_2, p_3} G_{0\uparrow}(p_3)G_{0\downarrow}(p + p_1 - p_3)G_{0\uparrow}(p_2)T_3(p_3; p, p_1, p_2). \quad (5.40)$$

Cette expression est analogue à celle du deuxième diagramme de la figure 5.11 (cf. équation (5.37) après avoir remplacé p'_1 par p_1), la seule différence étant que $T_2(p + p_1)$ doit être remplacé par g . Comme $g \rightarrow 0$, nous en déduisons que la contribution du diagramme de la figure 5.16 est nulle. À nouveau, cela résulte simplement du fait que tout diagramme avec un nombre fini d'interactions successives est nul. Ainsi, la fonction

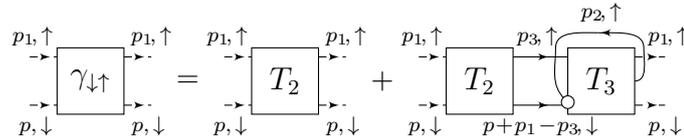


FIG. 5.17: La fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1)$ obtenue en ne retenant que les diagrammes avec au plus deux lignes de propagateurs explicites d'atomes \uparrow .

$\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1)$ est donnée par la somme des deux diagrammes de la figure 5.17 qui correspond

à l'équation :

$$\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1) = T_2(p + p_1) \left[1 + \sum_{p_2, p_3} G_{0\uparrow}(p_3) G_{0\downarrow}(p + p_1 - p_3) G_{0\uparrow}(p_2) T_3(p_3; p, p_1, p_2) \right], \quad (5.41)$$

où les signes sont obtenus de la même manière que pour le *vertex* d'interaction $\Gamma_{\downarrow\uparrow}$.

5.3.2 Intégration sur les fréquences

Nous allons maintenant effectuer l'intégration sur les fréquences dans les équations (5.37), (5.38) et (5.41) à l'aide de la première remarque de la section 5.1.5. Rappelons tout d'abord que dans ces équations le quadrivecteur p est un paramètre et que nous avons posé, depuis la section précédente, $\omega = 0$, i.e. $p = (\mathbf{p}, 0)$. Remarquons ensuite que pour la valeur physique de l'énergie E solution des équations (5.7) ou (5.13), le *vertex* $T_2(\mathbf{P}, \Omega)$ est une fonction analytique pour $\text{Re } \Omega < 0$. En effet, d'après la propriété (5.13), nous savons que $\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1)$ ne doit pas avoir de singularité pour $\text{Re } \omega_1 < 0$ (sinon nous aurions $n_{\downarrow} \neq 0$). Or, puisque $T_2(\mathbf{P}, \omega_1)$ intervient dans l'équation (5.41), une singularité de T_2 produirait automatiquement une singularité de $\gamma_{\downarrow\uparrow}$. Nous déduisons alors des équations (5.37) et (5.38) que $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1)$ et $T_3(p_1; p, p'_1, p'_2)$ sont des fonctions analytiques pour $\text{Re } \omega_1 > 0$, $\text{Re } \omega'_1 < 0$ et $\text{Re } \omega'_2 < 0$. Cela peut être obtenu de deux manières. Nous pouvons par exemple supposer de manière auto-cohérente que le résultat est vrai dans les membres de droite de ces équations, puis vérifier que les différents termes sont alors analytiques. Nous pouvons également procéder à un développement perturbatif des équations et vérifier que les différentes fonctions T_2 et $G_{0\downarrow}$ qui interviennent sont bien analytiques dans le domaine considéré.

Dans les trois équations (5.37), (5.38) et (5.41), le propagateur $G_{0\uparrow}(p_2)$ est dirigé vers l'arrière alors que $G_{0\uparrow}(p_3)$ est dirigé vers l'avant. Pour effectuer les intégrations sur ω_2 et ω_3 , nous fermons donc les contours d'intégration pour $\text{Re } \omega_2 < 0$ et $\text{Re } \omega_3 > 0$.

Pour l'équation (5.37), rappelons que T_3 ne dépend pas de sa deuxième variable en entrée. $T_3(p_3; p, p'_1, p_2)$ et $T_3(p_1; p, p'_1, p_2)$ n'ont pas de singularité pour $\text{Re } \omega_2 < 0$, la seule contribution provient donc du pôle de $G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_2, \omega_2)$ pour $\omega_2 = \omega_{\mathbf{p}_2}$. La contrainte $\text{Re } \omega_{\mathbf{p}_2} < 0$ impose $p_2 < k_F$. De même, $T_3(p_3; p, p'_1, p_2)$ n'a pas de singularité pour $\text{Re } \omega_3 > 0$. $G_{0\downarrow}(p + p'_1 - p_3)$ est également analytique dans ce demi-plan. En effet, son unique pôle se situe en $\omega_3 = \omega'_1 - E_{\mathbf{p} + \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_3} - |E|$ dont la partie réelle est négative puisque ω'_1 est sur l'axe imaginaire. La seule contribution provient donc du pôle de $G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_3, \omega_3)$ pour $\omega_3 = \omega_{\mathbf{p}_3}$ et la contrainte $\text{Re } \omega_{\mathbf{p}_3} > 0$ impose $p_3 > k_F$. De plus, le sens du contour d'intégration sur ω_3 donne un signe $-$. En faisant le changement de notations consistant à remplacer \mathbf{p}_2 par \mathbf{q}' et \mathbf{p}_3 par \mathbf{k}' , nous obtenons :

$$\begin{aligned} \Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1) = & T_2(p + p'_1) \left[1 - \sum'_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} G_{0\downarrow}(\mathbf{p} + \mathbf{p}'_1 - \mathbf{k}', \omega'_1 - \omega_{\mathbf{k}'}) T_3(\{\mathbf{k}', \omega_{\mathbf{k}'}\}; p, p'_1, \{\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'}\}) \right] \\ & - \sum'_{\mathbf{q}'} T_3(p_1; p, p'_1, \{\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'}\}), \end{aligned} \quad (5.42)$$

où nous avons utilisé la notation \sum' du chapitre 2 qui signifie que la somme est implicite-

ment limitée à $k' > k_F$ et $q' < k_F$. Précisons que cette équation est valable a priori pour des fréquences ω_1 et ω'_1 sur l'axe imaginaire. Cependant, en prenant le prolongement analytique des deux membres, nous en déduisons qu'elle est valable pour l'ensemble du plan complexe des fréquences.

De même, pour l'équation (5.38), $T_3(p_3; p, p'_1, p'_2)$ est analytique pour $\text{Re } \omega_3 > 0$ et l'unique pôle de $G_{0\downarrow}(p+p'_1+p'_2-p_1-p_3)$, $\omega_3 = \omega'_1 + \omega'_2 - \omega_1 - E_{\mathbf{p}+\mathbf{p}'_1+\mathbf{p}'_2-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_3} - |E|$, a une partie réelle négative puisque ω'_1, ω'_2 et ω_1 sont sur l'axe imaginaire. La seule contribution provient donc du pôle de $G_{0\uparrow}(\mathbf{p}_3, \omega_3)$ pour $\omega_3 = \omega_{\mathbf{p}_3}$ et la contrainte $\text{Re } \omega_{\mathbf{p}_3} > 0$ impose $p_3 > k_F$. Le sens du contour d'intégration donne également un signe $-$. En remplaçant \mathbf{p}_3 par \mathbf{k}' , nous avons :

$$\begin{aligned} T_3(p_1; p, p'_1, p'_2) &= -T_2(p + p'_1 + p'_2 - p_1) \\ &\times \left[\sum'_{\mathbf{k}'} G_{0\downarrow}(\mathbf{p}+\mathbf{p}'_1+\mathbf{p}'_2-\mathbf{p}_1-\mathbf{k}', \omega'_1+\omega'_2-\omega_1-\omega_{\mathbf{k}'}) T_3(\{\mathbf{k}', \omega_{\mathbf{k}'}\}; p, p'_1, p'_2) \right. \\ &\left. + G_{0\downarrow}(p + p'_1 - p_1) \Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1) - G_{0\downarrow}(p + p'_2 - p_1) \Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_2) \right], \end{aligned} \quad (5.43)$$

qui se prolonge à nouveau à l'ensemble du plan complexe des fréquences.

Enfin, le calcul de l'intégrale de l'équation (5.41) est identique à celui de la première intégrale de l'équation (5.37). $\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1)$ est donc donné par les deux premiers termes de l'équation (5.42) où nous devons remplacer p'_1 par p_1 et où nous utilisons la variable \mathbf{k} à la place de \mathbf{k}' :

$$\gamma_{\downarrow\uparrow}(p, p_1) = T_2(p + p_1) \left[1 - \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} G_{0\downarrow}(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1-\mathbf{k}, \omega_1-\omega_{\mathbf{k}}) T_3(\{\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}\}; p, p_1, \{\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'}\}) \right]. \quad (5.44)$$

Cette dernière équation montre que la fonction $\gamma_{\downarrow\uparrow}$ ne fait intervenir que la valeur *on-the-shell* de $T_3(p_1; p, p'_1, p'_2)$ pour $p_1 = \{\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}\}$ et $p'_2 = \{\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'}\}$ (avec $k > k_F$ et $q' < k_F$). En remplaçant p_1 et p'_2 par leur valeur *on-the-shell* dans l'équation (5.43), nous obtenons une équation intégrale pour $T_3(\{\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}\}; p, p'_1, \{\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'}\})$ où intervient dans le second membre uniquement la valeur *on-the-shell* de $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(p_1; p, p'_1)$ pour $p_1 = \{\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}\}$ (avec $k > k_F$). Enfin, l'équation (5.42) montre que $\Gamma_{\downarrow\uparrow}(\{\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}\}; p, p'_1)$ s'exprime à l'aide de la valeur *on-the-shell* de T_3 . Nous définissons donc deux fonctions inconnues :

$$G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, \omega_1) = T_3(\{\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}\}; \{\mathbf{p}, 0\}, \{\mathbf{p}_1, \omega_1\}, \{\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'}\}), \quad (5.45)$$

et

$$\Gamma_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}(\mathbf{p}_1, \omega_1) = \Gamma_{\downarrow\uparrow}(\{\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}\}; \{\mathbf{p}, 0\}, \{\mathbf{p}_1, \omega_1\}), \quad (5.46)$$

et réécrivons les équations (5.42), (5.43) et (5.44) pour ces deux fonctions. Nous pouvons exprimer les fonctions de Green qui interviennent dans ces équations à l'aide de $\bar{E}_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}^{(1)} = |E| + E_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\uparrow}$ et $\bar{E}_{\mathbf{p}, \mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(2)} = |E| + E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}'-\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{q}'} - \mu_{\uparrow}$. En effet, nous avons par exemple $G_{0\downarrow}(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1-\mathbf{k}, \omega_1-\omega_{\mathbf{k}}) = -[\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \mathbf{k}}^{(1)} - \omega_1]^{-1}$ ou $G_{0\downarrow}(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1+\mathbf{q}'-\mathbf{k}-\mathbf{k}', \omega_1+\omega_{\mathbf{q}'}-\omega_{\mathbf{k}}-\omega_{\mathbf{k}'}) = -[\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(2)} - \omega_1]^{-1}$. Remarquons également que si nous évaluons ces deux

dernières expressions *on-the-shell* en $p_1 = \{\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}\}$, nous retrouvons les quantités $E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}_j}^{(n)}$ introduites dans le chapitre 2 puisque $\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{(1)} - \omega_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}}^{(1)}$ et $\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(2)} - \omega_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(2)}$. Ainsi, en passant le facteur T_2 dans le membre de gauche, l'équation (5.43) donne :

$$\begin{aligned} & [T_2(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1+\mathbf{q}'-\mathbf{k}, \omega_1+\epsilon_{\mathbf{q}'}-\epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1} G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, \omega_1) \\ &= \sum'_{\mathbf{k}'} \frac{G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}', \mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, \omega_1)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \mathbf{k}, \mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(2)} - \omega_1} + \frac{\Gamma_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}(\mathbf{p}_1, \omega_1)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \mathbf{k}}^{(1)} - \omega_1} - \frac{\Gamma_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}(\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'})}{E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}'}^{(1)}}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

De la même manière, les équations (5.42) et (5.44) donnent :

$$\Gamma_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}(\mathbf{p}_1, \omega_1) = T_2(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \omega_1) \left[1 + \sum'_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} \frac{G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}'\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, \omega_1)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \mathbf{k}'}^{(1)} - \omega_1} \right] - \sum'_{\mathbf{q}'} G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, \omega_1), \quad (5.48)$$

et

$$\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, 0; \mathbf{p}_1, \omega_1) = T_2(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \omega_1) \left[1 + \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} \frac{G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, \omega_1)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \mathbf{k}}^{(1)} - \omega_1} \right]. \quad (5.49)$$

5.3.3 Énergie du polaron

L'énergie du polaron est alors donnée par les équations (5.7) et (5.16). Dans notre approximation, nous obtenons :

$$E = E_{\mathbf{p}} + \sum'_{\mathbf{q}} T_2(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}) \left[1 + \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} \frac{G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}'}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})}{E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}}^{(1)}} \right], \quad (5.50)$$

où nous avons utilisé à nouveau la relation $\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{(1)} - \omega_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}}^{(1)}$. En évaluant l'équation (5.48) en $\{\mathbf{p}_1, \omega_1\} = \{\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}\}$, et à l'aide de l'équation (5.49), nous obtenons une équation intégrale pour la fonction de trois variables $G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}'}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$ (\mathbf{p} est un paramètre). Plus précisément, ces équations sont *identiques* à celles que nous avons écrites dans le chapitre 2 [CG08] à l'aide de l'approche hamiltonienne en utilisant au plus deux excitations particule-trou pour le polaron (cf. équations (2.48), (2.50), (2.54) et (2.53)) : il suffit de remarquer que les crochets des membres de gauche des équations (2.50) et (2.53) s'expriment simplement à l'aide du *vertex* T_2 (cf. expression (5.19)) et de remplacer $G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}'}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$ par $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$, $\Gamma_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$ par $-E_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}}^{(1)} \alpha_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}$ et $\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, 0; \mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$ par $F_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$. Nous obtenons donc naturellement les mêmes valeurs pour le potentiel chimique et la masse effective de l'atome \downarrow .

5.3.4 Énergie de l'état lié

L'énergie de l'état lié est donnée par la divergence de $\gamma_{\downarrow\uparrow} : [\gamma_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{p}, 0; \mathbf{p}_1, 0)]^{-1} = 0$. D'après l'équation (5.49), cette divergence peut provenir du facteur $T_2(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, 0)$, mais il s'agit simplement de la condition donnée par l'approximation de la matrice T (cf. équation (5.24)). Puisque le dénominateur $\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \mathbf{k}}^{(1)} = |E| + E_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1-\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\uparrow}$ ne s'annule pas pour $k > k_F$, la seule autre possibilité est la divergence de $G_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0)$. En évaluant

l'équation (5.47) en $\omega_1 = 0$ et en remplaçant $\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{k}}(\mathbf{p}_1, 0)$ et $\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{k}}(\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'})$ dans son membre de droite par leur expression (5.48), nous trouvons que la fonction de deux variables $G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0)$ (\mathbf{p} et \mathbf{p}_1 sont cette fois-ci des paramètres) est solution de l'équation :

$$\begin{aligned} [T_2(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1+\mathbf{q}'-\mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{q}'}-\epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1}G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0) &= \sum'_{\mathbf{k}'} \frac{G_{\mathbf{p},\mathbf{k}'\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(2)}} \\ &+ \frac{T_2(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}}^{(1)}} \left[1 + \sum'_{\mathbf{k}'\mathbf{q}''} \frac{G_{\mathbf{p},\mathbf{k}'\mathbf{q}''}(\mathbf{p}_1, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}'}^{(1)}} \right] - \frac{1}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}}^{(1)}} \sum'_{\mathbf{q}''} G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}''}(\mathbf{p}_1, 0) \\ &- \frac{T_2(\mathbf{p}+\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'})}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}^{(1)}} \left[1 + \sum'_{\mathbf{k}'\mathbf{q}''} \frac{G_{\mathbf{p},\mathbf{k}'\mathbf{q}''}(\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'})}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(1)}} \right] + \frac{1}{E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}^{(1)}} \sum'_{\mathbf{q}''} G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}''}(\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'}) . \end{aligned} \quad (5.51)$$

Cette équation peut s'écrire sous la forme d'un système linéaire $AG(\mathbf{p}_1, 0) = Y$ où nous avons regroupé dans le second membre Y tous les termes ne faisant pas intervenir $G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0)$. Y s'exprime donc en fonction de T_2 et $G_{\mathbf{p},\mathbf{k}'\mathbf{q}''}(\mathbf{q}', \omega_{\mathbf{q}'}) = G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}', \mathbf{q}', \mathbf{q}'')$. De manière générale, la solution d'un tel système est divergente si le second membre diverge ou si l'opérateur A n'est pas inversible. Remarquons qu'ici, c'est la deuxième alternative qui correspond à la valeur minimale de l'énergie E . En effet, les équations (5.47) et (5.48) montrent que $G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, \omega_1)$ est une fonction de $E + \omega_1$ plutôt que de ω_1 (comme c'est le cas pour les propagateurs libres $G_{0\downarrow}$). Ainsi, en augmentant progressivement la valeur de E à partir de valeurs très négatives, nous voyons qu'une divergence apparaît d'abord pour la fréquence $\omega_1 = 0$, avant d'apparaître pour $\omega_1 = \omega_{\mathbf{q}'}$ (qui est négative puisque $q' < k_F$). L'énergie physique E qui correspond à la plus petite des valeurs provient donc de la non-inversibilité du système linéaire, c'est-à-dire de l'existence d'une solution à l'équation homogène associée. Cette équation se déduit immédiatement de (5.51) en ne retenant que les termes faisant intervenir $G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0)$. Elle s'écrit :

$$\begin{aligned} [T_2(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1+\mathbf{q}'-\mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{q}'}-\epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1}G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0) \\ = \sum'_{\mathbf{k}'} \frac{G_{\mathbf{p},\mathbf{k}'\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(2)}} + \frac{T_2(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}}^{(1)}} \sum'_{\mathbf{k}'\mathbf{q}''} \frac{G_{\mathbf{p},\mathbf{k}'\mathbf{q}''}(\mathbf{p}_1, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}'}^{(1)}} - \frac{1}{\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}}^{(1)}} \sum'_{\mathbf{q}''} G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}''}(\mathbf{p}_1, 0) . \end{aligned} \quad (5.52)$$

Notons que les paramètres \mathbf{p} et \mathbf{p}_1 n'apparaissent ici qu'à travers $\mathbf{p} + \mathbf{p}_1$. Nous en déduisons donc de manière auto-cohérente que la solution de cette équation ne dépend que de l'impulsion totale $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1$. Nous la noterons désormais $\bar{G}_{\mathbf{P},\mathbf{k}\mathbf{q}} = G_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}(\mathbf{p}_1, 0)$. Ainsi, comme dans le cas de l'approximation de la matrice T , l'énergie de la quasi-particule correspondant à l'état lié $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ ne dépend que de \mathbf{P} . En utilisant \bar{G} et en remplaçant \mathbf{q}' par \mathbf{q} et \mathbf{q}'' par \mathbf{q}' , nous obtenons alors immédiatement :

$$[T_2(\mathbf{P}+\mathbf{q}-\mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1}\bar{G}_{\mathbf{P},\mathbf{k}\mathbf{q}} = \sum'_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{G}_{\mathbf{P},\mathbf{k}'\mathbf{q}}}{\bar{E}_{\mathbf{P},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^{(2)}} + \frac{T_2(\mathbf{P}, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{P},\mathbf{k}}^{(1)}} \sum'_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} \frac{\bar{G}_{\mathbf{P},\mathbf{k}'\mathbf{q}'}}{\bar{E}_{\mathbf{P},\mathbf{k}'}^{(1)}} - \frac{1}{\bar{E}_{\mathbf{P},\mathbf{k}}^{(1)}} \sum'_{\mathbf{q}' } \bar{G}_{\mathbf{P},\mathbf{k}\mathbf{q}'} . \quad (5.53)$$

Il s'agit d'une équation intégrale homogène à deux variables \mathbf{k} et \mathbf{q} , et un paramètre \mathbf{P} . Après discrétisation des intégrales, on se ramène à un système linéaire homogène. L'énergie de l'état lié $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ correspond à la valeur de E pour laquelle le déterminant de ce

système s'annule. Cependant, il s'est avéré plus simple de se ramener à un problème aux valeurs propres. En passant le facteur $T_2(\mathbf{P}+\mathbf{q}-\mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})$ dans le membre de droite de l'équation (5.53), nous obtenons un système de la forme $\bar{G} = A\bar{G}$. L'énergie $E[\mathbf{p}, \mathbf{p}_1]$ est alors la valeur de E pour laquelle 1 est la plus grande valeur propre de l'opérateur A .

En pratique, pour une valeur donnée de E , nous devons donc calculer la plus grande valeur propre de A . Or, nous avons vérifié numériquement que les valeurs propres de A sont supérieures à -2 . Ainsi, l'opérateur $B = A + 2I$ a toutes ses valeurs propres positives et la valeur propre qui nous intéresse est celle de plus grande valeur absolue. Sa détermination est beaucoup plus simple que la recherche de toutes les valeurs propres de B . Elle est effectuée à l'aide de la méthode de la puissance qui consiste à calculer la suite de vecteurs $v_{n+1} = Bv_n/\|Bv_n\|$ initialisée avec un vecteur v_0 normé aléatoire. On peut alors montrer que si la composante de v_0 sur l'espace propre correspondant à la valeur propre de plus grand module de B n'est pas nulle, v_n converge vers un vecteur de cet espace propre et $\lambda_n = \langle v_n | Bv_n \rangle$ vers la valeur propre correspondante. La convergence est géométrique et fait intervenir le rapport de la deuxième plus grande valeur propre de B sur sa plus grande valeur propre. La valeur propre cherchée pour A est alors immédiatement obtenue en lui retranchant 2. Un avantage important de cette méthode est qu'elle ne nécessite pas le stockage de la matrice complète B (ou A), dont la taille peut être grande ($> 40\,000 \times 40\,000$) même en utilisant un nombre raisonnable de points pour la discrétisation des intégrales. En stockant de manière judicieuse certains calculs intermédiaires, nous avons ainsi pu réduire considérablement le coût mémoire et le temps de calcul. Enfin, la valeur de l'énergie E est ajustée par une méthode classique de résolution numérique d'équation pour que la valeur propre calculée de A soit 1.

5.3.5 Résultats

Nous représentons sur la figure 5.18 la valeur du potentiel chimique du polaron et de l'état lié dans cette approximation lorsque les masses sont égales $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$. Nous avons également indiqué les résultats donnés par l'approximation de la matrice T (cf. figure 5.5). Alors que pour le polaron il est difficile de distinguer les deux courbes, nous voyons que pour l'état lié, le changement entre l'ordre 1 et l'ordre 2 est plus important. Plus précisément, lorsque $1/k_F a = 1$, nous trouvons dans l'approximation de la matrice T , $\mu_{\downarrow} = -2.3660 E_F$, alors que le résultat avec deux lignes de propagateurs \uparrow est $\mu_{\downarrow} = -2.6182 E_F$. Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a] ont également calculé cette valeur à l'aide d'une technique de type Monte-Carlo Diagrammatique. Ils ont obtenu $\mu_{\downarrow} = -2.616 E_F$ ou $\mu_{\downarrow} = -2.619 E_F$ en fonction de la technique de resommation utilisée pour l'échantillonnage de la série intervenant dans le développement diagrammatique du propagateur de paires. Ainsi, comme pour le polaron, notre calcul prenant en compte deux lignes de propagateurs \uparrow se révèle être en très bon accord avec les calculs Monte-Carlo. Naturellement, nous pouvons vérifier la rapidité de convergence de cette série en comparant nos résultats avec la solution exacte lorsque celle-ci est connue, c'est-à-dire lorsque $m_{\downarrow} = \infty$. Pour $1/k_F a = 1$, l'approximation de la matrice T donne alors $\mu_{\downarrow} = -1.683 E_F$ et le résultat avec deux lignes de propagateurs \uparrow est $\mu_{\downarrow} = -1.815 E_F$, alors que la valeur exacte est $\mu_{\downarrow} = -(3/2 + 1/\pi)E_F \simeq -1.818 E_F$ (cf. équation (2.35)). Notons que nous pouvons également effectuer, de la même manière que pour le polaron,

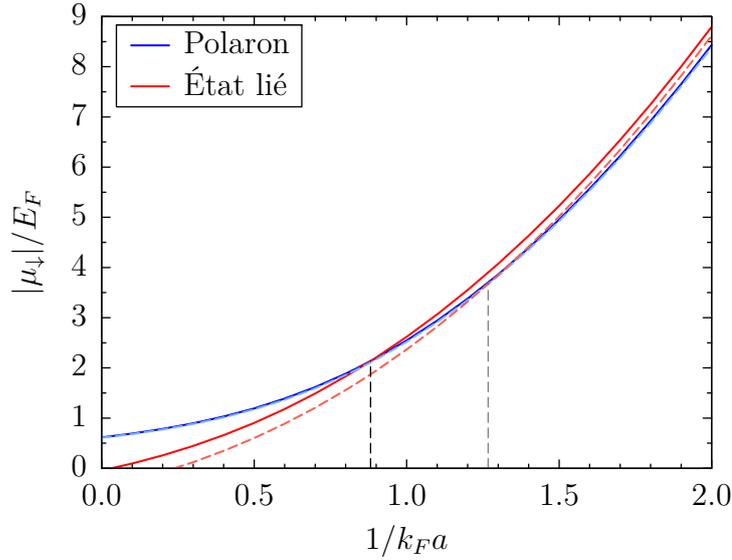


FIG. 5.18: Potentiel chimique du polaron et de l'état lié, à l'ordre 1 en tirets clairs et à l'ordre 2 en traits pleins, pour des valeurs positives de $1/k_F a$ lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow$. Les lignes verticales noires en tirets indiquent la valeur critique de l'interaction correspondant à l'apparition de l'état lié à l'ordre 1, $1/(k_F a)_c = 1.27$, et à l'ordre 2, $1/(k_F a)_c = 0.88$.

l'approximation $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ dans l'équation (5.53). Lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow$, nous obtenons $\mu_\downarrow = -2.6071 E_F$ et lorsque $m_\downarrow = \infty$, nous avons $\mu_\downarrow = -1.783 E_F$. Ainsi, à nouveau, cette simple approximation fournit des résultats très proches de la résolution numérique exacte de l'équation donnant l'énergie de la quasi-particule. Nous utiliserons cette observation à la fin de cette section.

Nous pouvons maintenant déterminer dans notre approximation la valeur critique de l'interaction à partir de laquelle l'état lié est énergétiquement favorisé. Nous trouvons $1/(k_F a)_c = 0.88$ alors que l'approximation de la matrice T nous avait donné $1/(k_F a)_c = 1.27$. Le changement entre l'ordre 1 et l'ordre 2 est donc significatif. Cela a deux origines : la modification non négligeable du potentiel chimique de l'état lié en tenant compte de 2 propagateurs \uparrow et l'angle de croisement très faible entre les courbes du polaron et de l'état lié qui rend cette valeur très sensible à de petites modifications. L'accord avec les calculs Monte-Carlo est à nouveau parfait. En effet, Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a] ont obtenu $1/(k_F a)_c = 0.90(2)$. Remarquons que cette valeur est plus grande que la valeur critique $1/k_F a = 0.73$, obtenue par Pilati et Giorgini [PG08], au-delà de laquelle la phase normale partiellement polarisée n'est plus présente pour une polarisation $P \rightarrow 1$ (cf. figure 1.12). Enfin, nous représentons sur la figure 5.19 la valeur de $1/(k_F a)_c$ dans cette approximation en fonction du rapport des masses $r = m_\downarrow/m_\uparrow$. Nous avons également reproduit les résultats donnés par l'approximation de la matrice T (cf. figure 5.7). Ainsi, dans la limite de l'impureté de masse infinie $m_\downarrow \rightarrow +\infty$, nos résultats semblent en accord avec $1/(k_F a)_c \rightarrow 0$, comme attendu d'après le calcul exact (2.35) pour lequel nous avons obtenu explicitement l'existence de l'état lié dès que $a > 0$. Cela n'était pas le cas avec l'approximation de la matrice T . Dans l'autre limite, lorsqu'on diminue la masse de

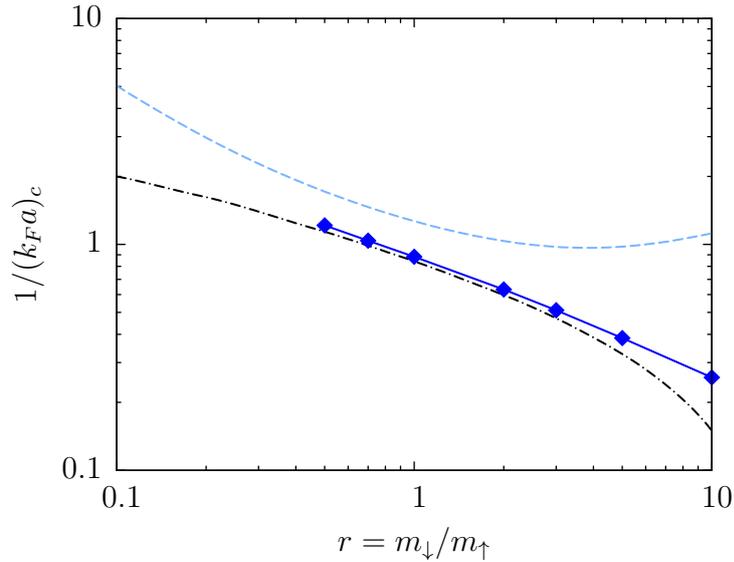


FIG. 5.19: Valeur critique de l'interaction obtenue comme intersection des courbes du potentiel chimique de l'état lié et du polaron à l'ordre 1 en tirets clairs et à l'ordre 2 en trait plein en fonction du rapport des masses $r = m_{\downarrow}/m_{\uparrow}$. La courbe en tirets-points correspond à l'intersection entre la courbe du polaron à l'ordre 1 et l'état lié à l'ordre 2.

l'impureté, la valeur critique de l'interaction semble augmenter jusqu'à l'infini, comme nous l'avons déjà obtenu à l'ordre 1. Cependant, dans cette limite, la convergence de nos simulations numériques est plus difficile pour le calcul de l'énergie du polaron. Pour les petites valeurs de r , nous avons donc calculé une valeur approchée de $1/(k_F a)_c$ en prenant la valeur à l'ordre 1 pour l'énergie du polaron (et à l'ordre 2 pour l'état lié). Cette approximation se révèle être assez bonne lorsque nous pouvons la comparer à la résolution numérique exacte. Cela résulte simplement du fait que la correction apportée par l'ordre 2 au potentiel chimique du polaron est assez faible par rapport à celle de l'état lié.

Enfin, nous avons calculé l'inverse de la masse effective des deux quasi-particules. Le résultat pour des masses égales $m_{\downarrow} = m_{\uparrow}$ est représenté sur la figure 5.20. Nous voyons que la modification entre l'ordre 1 et l'ordre 2 est relativement importante au voisinage de la transition. Remarquons que c'est également au niveau de la transition que la masse effective est maximale. Ces deux caractéristiques sont physiquement raisonnables puisque c'est dans cette zone que le nombre d'atomes \uparrow habillant la quasi-particule est le plus grand, rendant le système plus sensible à notre approximation ne faisant intervenir qu'au plus 2 paires particule-trou. À nouveau, l'accord avec les calculs de type Monte-Carlo Diagrammatique [PS08b, PS08a] est très bon, puisque nos résultats sont systématiquement dans les barres d'erreur. Comme pour le calcul dans l'approximation de la matrice T , la masse effective de la quasi-particule devient négative lorsqu'on l'a calculé au-delà de la transition. Nous remarquons de plus que pour le calcul à l'ordre 2, cela se produit avant les valeurs de $1/k_F a$ que nous avons trouvées à l'ordre 1. Enfin, nous voyons que la masse effective est presque continue à la transition, le saut de discontinuité

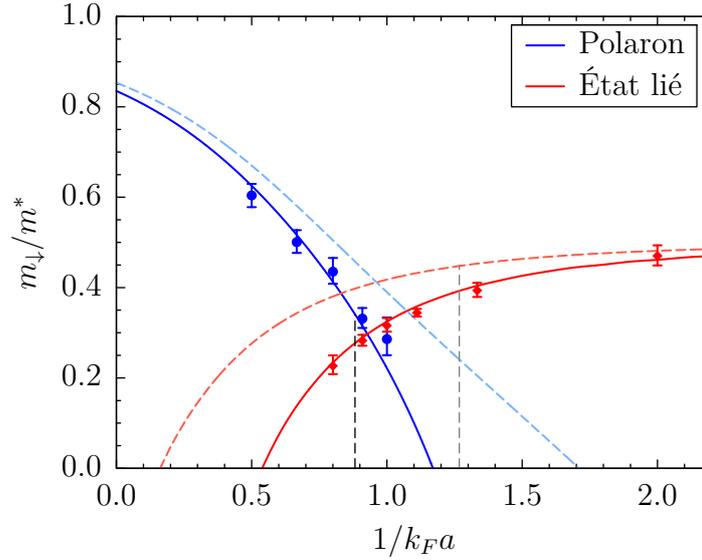


FIG. 5.20: Inverse de la masse effective du polaron et de l'état lié, à l'ordre 1 en tirets clairs et à l'ordre 2 en traits pleins, pour des valeurs positives de $1/k_F a$ lorsque $m_\downarrow = m_\uparrow$ [CGL09]. Les lignes verticales noires en tirets indiquent la valeur critique de l'interaction correspondant à l'apparition de l'état lié à l'ordre 1, $1/(k_F a)_c = 1.27$, et à l'ordre 2, $1/(k_F a)_c = 0.88$. Les points avec barres d'erreur correspondent aux calculs de type Monte-Carlo Diagrammatique réalisés par Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a].

étant très inférieur à celui que nous avons à l'ordre 1. Il est donc tentant d'affirmer que la continuité est parfaite pour la solution exacte. En effet, il est physiquement raisonnable de penser qu'à la transition, le polaron et l'état lié sont en fait le même objet physique, et ont par conséquent la même masse effective. Deux arguments vont dans ce sens. Tout d'abord, comme nous l'avons vu, l'angle entre les courbes du potentiel chimique du polaron et de l'état lié est très faible, et cet angle pourrait être en fait nul pour la solution exacte. Ensuite, nous avons vu que lorsque $m_\downarrow = \infty$, le potentiel chimique est une fonction totalement régulière (et même analytique) de $1/k_F a$ lorsque nous traversons la transition. Pour tenter d'éclaircir ce point, nous avons calculé la masse effective pour d'autres valeurs du rapport des masses. Lorsque $m_\downarrow = 2m_\uparrow$, nous obtenons des résultats tout à fait similaires à ceux du cas des masses égales. Nous représentons sur la figure 5.21 nos résultats pour $m_\downarrow = 5m_\uparrow$ et $m_\downarrow = 0.5m_\uparrow$. Dans le premier cas, la discontinuité à la transition est encore plus faible que pour des masses égales, Par contre, lorsque $m_\downarrow = 0.5m_\uparrow$, cette propriété n'est plus très bien satisfaite. Mais nous voyons qu'il suffit d'une petite modification de la valeur critique de l'interaction de $1/(k_F a)_c = 1.22$ à $1/(k_F a)_c = 1.15$ pour que cela soit à nouveau le cas. Or, nous avons déjà observé que la convergence de nos calculs est plus difficile lorsque nous allons dans la limite de faible masse.

Ainsi, la question reste ouverte et les expériences récentes [NNJ⁺09, NNJ⁺10] au cours desquelles la masse effective du polaron à l'unitarité a été mesurée avec une grande précision pourraient permettre d'y répondre. Notons que la nature de cette transition a égale-

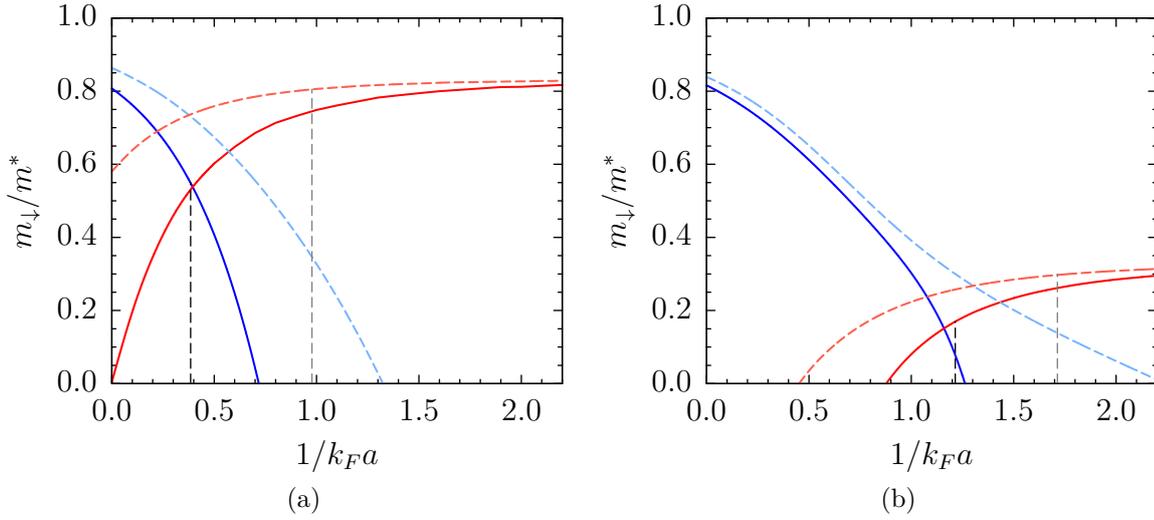


FIG. 5.21: Inverse de la masse effective du polaron et de l'état lié, à l'ordre 1 en tirets clairs et à l'ordre 2 en traits pleins, pour des valeurs positives de $1/k_F a$ lorsque $m_{\downarrow} = 5m_{\uparrow}$ (a) et $m_{\downarrow} = 0.5m_{\uparrow}$ (b). Les lignes verticales noires en tirets indiquent la valeur critique de l'interaction correspondant à l'apparition de l'état lié à l'ordre 1, $1/(k_F a)_c = 0.98$ (a) et $1/(k_F a)_c = 1.72$ (b), et à l'ordre 2, $1/(k_F a)_c = 0.38$ (a) et $1/(k_F a)_c = 1.22$ (b).

ment été considérée par Prokof'ev et Svistunov [PS08b, PS08a]. Ils affirment notamment que les deux quasi-particules sont des excitations stables au-delà de la transition. Pour une valeur donnée de l'interaction, les deux états seraient donc accessibles en partant de la zone de couplage faible pour le polaron et de la limite BEC pour l'état lié, comme c'est le cas pour une transition d'ordre 1. Leur argument est le suivant : les lois de conservation de l'énergie, de l'impulsion et du nombre de particules imposent que le processus de recombinaison d'un polaron en état lié ou d'un état lié en polaron fasse intervenir 4 particules. Le volume dans l'espace des phases de l'état final varie donc comme la valeur absolue de la différence des énergies du polaron et de l'état lié et s'annule à la transition. Notons que cet argument a été récemment développé par Bruun et Massignan [BM10]. Punk *et al.* [PDZ09] ont également affirmé que cette transition est d'ordre 1 en considérant le coefficient de contact qui intervient par exemple dans le comportement à grand vecteur d'onde de la densité comme l'a montré Tan [Tan08]. Ils ont en effet obtenu une discontinuité de ce coefficient de contact à la transition. Remarquons cependant que leur calcul repose sur deux descriptions variationnelles différentes pour le polaron et l'état lié. Ces deux descriptions sont bien sûr approchées et ne sont exactes que respectivement dans les limites BCS et BEC. Il n'est donc pas certain que cette discontinuité subsiste pour la solution exacte.

5.3.6 Limite BEC

Nous nous intéressons ici à nouveau à la limite BEC, $1/k_F a \rightarrow \infty$, et montrons que les équations que nous avons obtenues en se limitant à deux lignes de propagateurs explicites d'atomes \uparrow se réduisent alors à l'équation de Skorniakov et Ter-Martirosian (cf.

équation (4.134) [CGL09]. Elles fournissent donc la valeur exacte du potentiel chimique μ_\downarrow dans cette limite jusqu'à l'ordre 1 en $k_F a$, puisqu'au niveau champ moyen, dans le développement de μ_\downarrow (cf. équation (5.29)), nous obtenons désormais la valeur exacte de a_3 , et non une valeur approximative. Dans notre approximation à l'ordre 2, le potentiel chimique de l'état lié est obtenu en remplaçant \mathbf{P} par $\mathbf{0}$ dans l'équation (5.53) :

$$[T_2(\mathbf{q}-\mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1} \bar{G}_{\mathbf{0}, \mathbf{k} \mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}'}' \frac{\bar{G}_{\mathbf{0}, \mathbf{k}' \mathbf{q}}}{\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{q}}^{(2)}} + \frac{T_2(\mathbf{0}, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k}}^{(1)}} \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{q}'}' \frac{\bar{G}_{\mathbf{0}, \mathbf{k}' \mathbf{q}'}}{\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k}'}^{(1)}} - \frac{1}{\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k}}^{(1)}} \sum_{\mathbf{q}'}' \bar{G}_{\mathbf{0}, \mathbf{k} \mathbf{q}'}. \quad (5.54)$$

Pour $k_F a \rightarrow 0^+$, nous mettons la solution sous la forme du développement asymptotique (5.29) :

$$\mu_\downarrow = -\epsilon_b - E_F + \frac{2\pi}{m_r^T} a_3 n_\uparrow + o(k_F a). \quad (5.55)$$

En remplaçant μ_\downarrow par ce développement dans l'expression de $T_2(\mathbf{0}, 0)$ (cf. équation (5.25)), nous obtenons :

$$\left[\frac{m_r T_2(\mathbf{0}, 0)}{2\pi a} \right]^{-1} = -\frac{2}{3\pi} \left[1 - \frac{R a_3}{2a} \right] (k_F a)^3 + o(k_F a)^3, \quad (5.56)$$

où $R = m_r/m_r^T = r(r+2)/(r+1)^2$. La limite $k_F a \rightarrow 0^+$ peut être vue comme la limite $k_F \rightarrow 0$ avec a fixée. Nous pouvons donc évaluer dans cette limite les sommes sur \mathbf{q}' avec $q' < k_F$, en utilisant la relation valable pour f régulière en 0 :

$$\sum_{\mathbf{q}'}' f(\mathbf{q}') \approx \frac{k_F^3}{6\pi^2} f(\mathbf{0}). \quad (5.57)$$

Ainsi, dans le membre de droite de l'équation (5.54), les deux premiers termes sont d'ordre 0 en $k_F a$ (pour le deuxième, la divergence de $T_2(\mathbf{0}, 0)$ en $1/(k_F a)^3$ est compensée par la somme sur \mathbf{q}'), alors que le dernier est d'ordre 3. Nous pouvons donc le négliger dans la limite BEC. En évaluant en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, nous obtenons alors l'équation suivante pour la fonction $g_{\mathbf{k}} = \bar{G}_{\mathbf{0}, \mathbf{k} \mathbf{0}}$:

$$[T_2(\mathbf{k}, -\epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1} g_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'}' \frac{g_{\mathbf{k}'}}{\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{0}}^{(2)}} + \frac{k_F^3}{6\pi^2} \frac{T_2(\mathbf{0}, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k}}^{(1)}} \sum_{\mathbf{k}'}' \frac{g_{\mathbf{k}'}}{\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k}'}^{(1)}}. \quad (5.58)$$

Remarquons que désormais les sommes sur \mathbf{k}' vont de 0 à l'infini, puisque nous avons pris la limite $k_F \rightarrow 0$. Nous devons maintenant évaluer les différents termes de l'équation (5.58) dans la limite $k_F \rightarrow 0$, avec a fixée. À l'ordre le plus bas, en utilisant $\mu_\downarrow + \mu_\uparrow = -1/2m_r a^2 = -\epsilon_b$ et en notant $\mathbf{x} = a\mathbf{k}$ et $\mathbf{x}' = a\mathbf{k}'$ les variables réduites, nous trouvons par exemple $\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k}}^{(1)} = \epsilon_b(1+x^2)$ et $\bar{E}_{\mathbf{0}, \mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{0}}^{(2)} = \epsilon_b(1+x^2+x'^2+R'\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}')$ où $R' = 2m_r/m_\downarrow = 2/(r+1)$. Il nous faut également évaluer dans cette limite $T_2(\mathbf{k}, -\epsilon_{\mathbf{k}})$. L'équation (5.19) donne :

$$[T_2(\mathbf{k}, -\epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1} = \frac{m_r}{2\pi a} + \sum_{\mathbf{k}'}' \left[\frac{1}{\epsilon_b + E_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'}} - \frac{2m_r}{k'^2} \right], \quad (5.59)$$

où à nouveau, la somme sur \mathbf{k}' n'est plus contrainte à $k' > k_F$. Dans le premier terme de la somme, nous pouvons isoler l'énergie du centre de masse en effectuant le changement de variable $\mathbf{k}' = \gamma_{\uparrow} \mathbf{k} + \mathbf{k}''$ où $\gamma_{\uparrow} = m_{\uparrow}/M$, nous obtenons $E_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'} = \mathbf{k}^2/2m_r^T + \mathbf{k}''^2/2m_r$. En utilisant la variable réduite $\mathbf{x} = a\mathbf{k}$, nous avons donc :

$$\left[\frac{m_r T_2(\mathbf{k}, -\epsilon_{\mathbf{k}})}{2\pi a} \right]^{-1} = 1 + \frac{1}{2\pi^2} \int d^3 \mathbf{x}' \left[\frac{1}{1 + Rx^2 + x'^2} - \frac{1}{x'^2} \right] = 1 - \sqrt{1 + Rx^2}. \quad (5.60)$$

En effectuant le changement de fonction inconnue $g_{\mathbf{k}} = a_3(\mathbf{x})/x^2$, nous pouvons maintenant réécrire l'équation (5.58) sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{Ra_3(\mathbf{x})}{1 + \sqrt{1 + Rx^2}} &= -4\pi \int \frac{d^3 \mathbf{x}'}{(2\pi)^3} \frac{a_3(\mathbf{x}')}{x'^2(1 + x^2 + x'^2 + R'\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}')} \\ &+ 4\pi \left[1 - \frac{Ra_3}{2a} \right]^{-1} \frac{1}{1 + x^2} \int \frac{d^3 \mathbf{x}'}{(2\pi)^3} \frac{a_3(\mathbf{x}')}{x'^2(1 + x'^2)}, \end{aligned} \quad (5.61)$$

où, dans le membre de gauche, nous avons utilisé la quantité conjuguée pour l'expression de T_2 (cf. équation (5.60)). Cette équation est une équation homogène en $a_3(\mathbf{x})$, nous pouvons donc supposer par exemple que :

$$4\pi \left[1 - \frac{Ra_3}{2a} \right]^{-1} \int \frac{d^3 \mathbf{x}'}{(2\pi)^3} \frac{a_3(\mathbf{x}')}{x'^2(1 + x'^2)} = a. \quad (5.62)$$

L'équation (5.61) devient alors :

$$\frac{Ra_3(\mathbf{x})}{1 + \sqrt{1 + Rx^2}} = -4\pi \int \frac{d^3 \mathbf{x}'}{(2\pi)^3} \frac{a_3(\mathbf{x}')}{x'^2(1 + x^2 + x'^2 + R'\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}')} + \frac{a}{1 + x^2}. \quad (5.63)$$

Enfin, en prenant $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ dans cette dernière équation (et en multipliant par $2/R$), nous trouvons :

$$a_3(\mathbf{0}) = \frac{2}{R} \left[-4\pi \int \frac{d^3 \mathbf{x}'}{(2\pi)^3} \frac{a_3(\mathbf{x}')}{x'^2(1 + x'^2)} + a \right] = a_3, \quad (5.64)$$

où la dernière égalité est obtenue à l'aide de la condition de normalisation (5.62). Les deux équations (5.63) et (5.64) coïncident avec les équations de Skorniakov et Ter-Martirosian [STM56], convenablement généralisées au cas de masses inégales, que nous avons obtenues à la fin du chapitre 4. Ainsi, dans le développement asymptotique du potentiel chimique (5.55), a_3 est la valeur exacte de la longueur de diffusion atome-dimère. Notre approximation est donc exacte dans la limite BEC jusqu'à l'ordre 1 en $k_F a$.

Puisque nous avons calculé numériquement la valeur du potentiel chimique de l'état lié à l'aide de l'équation (5.53), nous pouvons désormais vérifier ce résultat. Pour cela, nous représentons sur la figure 5.22 le potentiel chimique réduit $\alpha \equiv (m_r^T/2\pi n_{\uparrow} a)(\epsilon_b + E_F - |\mu_{\downarrow}|)$ qui tend vers a_3/a dans la limite BEC d'après le développement asymptotique (5.55). Remarquons également que dans la définition de α nous multiplions par $1/k_F a$ qui devient très grand dans cette limite, ce qui a pour effet d'amplifier de petites erreurs sur le potentiel chimique. Cependant, il n'en est rien puisque la figure 5.22 montre que α converge avec une très grande précision vers la valeur exacte de a_3 ($a_3 = 1.18 a$ pour

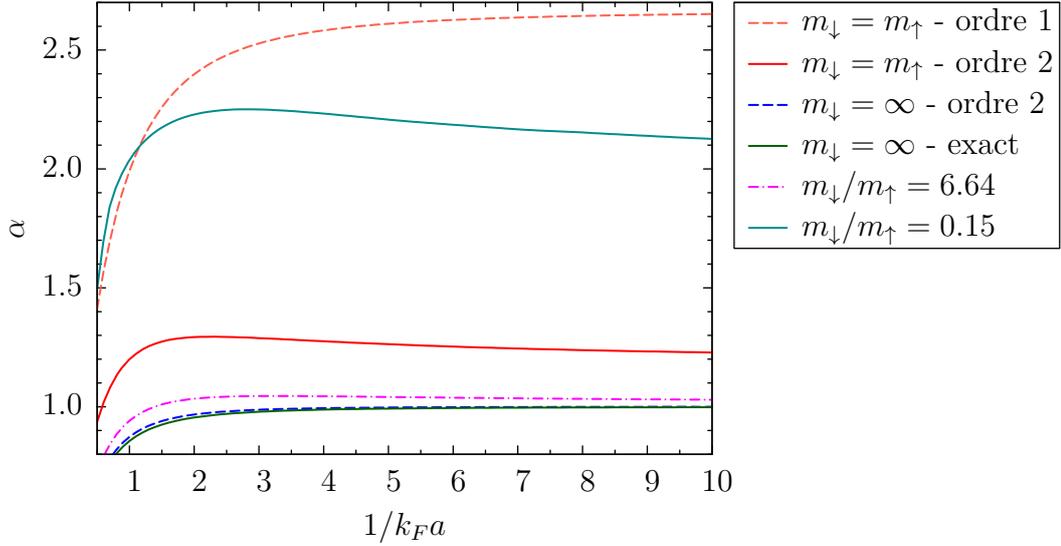


FIG. 5.22: Potentiel chimique réduit $\alpha \equiv (m_r^T/2\pi n_\uparrow a)(\epsilon_b + E_F - |\mu_\downarrow|)$ de l'état lié en fonction de $1/k_F a$ et pour différents rapports des masses [CGL09].

des masses égales) dans notre approximation prenant en compte deux paires particule-trou. Nous avons aussi représenté sur cette figure la valeur du potentiel chimique réduit dans le cadre de l'approximation de la matrice T et pouvons vérifier que α converge alors vers la valeur de a_3 dans l'approximation de Born ($a_3^B = 8/3 a$ pour des masses égales). Une autre caractéristique importante de nos résultats à l'ordre 2 est que le potentiel chimique réduit est essentiellement constant et peut être remplacé par sa valeur asymptotique a_3/a dès que $1/k_F a \gtrsim 2$. Ainsi, le développement (5.55) est une excellente approximation du potentiel chimique même pour des valeurs relativement faibles de $1/k_F a$. Notons que ce point a également été mis en évidence par les calculs de type Monte-Carlo [PG08, PS08b]. Plus précisément, nous avons pu vérifier que pour $1/k_F a \gtrsim 2$, la valeur de α est légèrement supérieure à sa valeur asymptotique, la décroissance vers a_3/a se faisant en $k_F a$.

Nous avons également représenté sur la figure 5.22 la situation avec des masses différentes. En particulier, dans le cas de l'impureté de masse infinie $m_\downarrow = \infty$ que nous avons déjà considéré à plusieurs reprises, nous pouvons vérifier l'excellente précision de notre approximation. Il est en effet difficile de distinguer nos résultats de la solution exacte, même à cette échelle mettant en évidence de très petits écarts dans la limite BEC. Remarquons également que, dans ce cas, la convergence de α vers sa valeur asymptotique $\alpha = 1$ est plus rapide : elle a lieu en $(k_F a)^2$ comme nous pouvons le vérifier à l'aide de l'expression analytique de μ_\downarrow (cf. équation (2.35)). Enfin, nous avons également représenté sur la figure 5.22 nos résultats pour un rapport des masses correspondant aux mélanges ^{40}K - ^6Li ($r = m_\downarrow/m_\uparrow = 6.64$) et ^6Li - ^{40}K ($r = 1/6.64 \approx 0.15$). La longueur de diffusion atome-dimère obtenue à l'aide de l'équation (4.134) vaut alors respectivement $a_3 = 1.01 a$ et $a_3 = 1.98 a$.

5.3.7 Généralisation à n paires particule-trou

Naturellement, nous pouvons généraliser notre traitement avec 3, 4, ... lignes de propagateurs explicites. Pour le polaron, comme nous l'avons vu pour les deux premiers ordres, cela revient à restreindre l'espace de Hilbert des états excités du système à 3, 4, ... paires particule-trou et nous avons déjà montré dans le chapitre 2 que cette série d'approximations converge très rapidement vers la solution exacte du problème. Cela est dû à une propriété d'antisymétrie et à un découplage des termes d'ordre supérieur si nous négligeons, à un ordre donné, la faible dépendance de $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}^{(n)}$ en les variables \mathbf{q}_j correspondant aux vecteurs d'onde des trous. Nous montrons ici que le même argument peut être appliqué au calcul de l'énergie de l'état lié, mais seulement à partir de l'ordre 2.

Nous devons donc écrire des équations à l'ordre suivant, analogues aux équations (5.47) et (5.48). Une première idée naturelle serait d'introduire un *vertex* T_4 décrivant l'interaction entre un atome \downarrow et trois atomes \uparrow et dessiner les diagrammes correspondants. Cependant, il est plus judicieux de tenir compte de l'observation suivante qui résulte de notre étude précédente : les équations de l'état lié peuvent être obtenues simplement à partir de celles du polaron en remplaçant l'évaluation *on-the-shell* $\omega_{\mathbf{q}}$ par 0 et \mathbf{q} par \mathbf{p}_1 . Avec les notations précédentes, cela revient essentiellement à rajouter formellement une barre sur les grandeurs où le vecteur \mathbf{q} est présent. Par exemple, $E_{\mathbf{p},\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}^{(n)}$ doit être remplacé par $\bar{E}_{\mathbf{p},\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}^{(n)}$ et $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$ doit être remplacé par $\bar{G}_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}'}$. Nous pouvons définir de la même manière des coefficients $\bar{\alpha}_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}$ correspondant aux $\alpha_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}$. Par exemple, nous avons $\bar{\alpha}_{\mathbf{k}\mathbf{p}_1} = -\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{k}}(\mathbf{p}_1, 0)/\bar{E}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1,\mathbf{k}}^{(1)}$ alors que nous avons vu dans la section 5.3.3 que $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = -\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{k}}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})/E_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$. Indiquons ici que, chronologiquement, c'est en fait de cette manière que nous avons obtenu pour la première fois les équations donnant le potentiel chimique de l'état lié, avant d'aboutir à la dérivation diagrammatique que nous avons présentée.

Appliquée aux équations à l'ordre 2, cette procédure rompt naturellement l'antisymétrie de $G_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$, puisque le terme source de l'équation (2.53) devient $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} - \bar{\alpha}_{\mathbf{k}\mathbf{p}_1}$ qui n'est plus antisymétrique sous l'échange de \mathbf{p}_1 et \mathbf{q}' . Remarquons que ce terme source est bien celui que nous avons dans l'équation (5.47). Ainsi, l'argument-clé que nous avons utilisé dans le chapitre 2 n'est plus valide pour le calcul du potentiel chimique de l'état lié à l'ordre 1, et la correction apportée par l'approximation à l'ordre 2 n'est pas négligeable. Ceci est apparent par exemple sur les résultats que nous avons obtenus pour des masses égales, sur la figure 5.18 et lorsque $1/k_F a = 1$: le résultat à l'ordre 1 est $\mu_{\downarrow} = -2.3660 E_F$ et à l'ordre 2 $\mu_{\downarrow} = -2.6182 E_F$. Cela correspond à une correction relative d'environ 10%, alors que pour le polaron, lorsque $1/k_F a = 0$, nous avons trouvé dans le chapitre 2 une correction relative de seulement 1.5%.

Cependant, l'argument est à nouveau valable à l'ordre suivant. En effet, en appliquant à l'équation (2.46) la procédure décrite, nous voyons que le seul terme supplémentaire qui intervient est $\sum'_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} \bar{\alpha}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\mathbf{p}_1\mathbf{q}'\mathbf{Q}}$. Or, nous pouvons écrire une équation analogue à l'équation (2.53) pour la fonction $H_{\mathbf{p}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'') \equiv g \sum'_{\mathbf{K}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{q}''}$, le terme source étant alors $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} - \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}''} + \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'\mathbf{q}''}$ (qui a les bonnes propriétés d'antisymétrie sous l'échange des \mathbf{k}_i et \mathbf{q}_j). En rajoutant les barres, nous obtenons alors $\bar{\alpha}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{p}_1\mathbf{q}'\mathbf{q}''} - \bar{\alpha}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{p}_1\mathbf{q}''} + \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'\mathbf{q}''}$, qui est antisymétrique sous l'échange de \mathbf{q}' et \mathbf{q}'' . Il en est donc de même pour $\bar{H}_{\mathbf{p},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'\mathbf{q}''} \equiv g \sum'_{\mathbf{K}} \bar{\alpha}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\mathbf{p}_1\mathbf{q}'\mathbf{q}''}$. Appliquons maintenant le même procédé que dans

le chapitre 2. Si nous négligeons le vecteur d'onde \mathbf{q}' du facteur $\bar{E}^{(2)}$ intervenant dans l'équation correspondant à (2.46) (i.e. nous effectuons $\bar{E}_{\mathbf{P},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'}^{(2)} \approx \bar{E}_{\mathbf{P},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}}^{(2)}$), nous pouvons sommer cette équation sur \mathbf{q}' . Cette approximation est justifiée par le fait que nous avons effectivement constaté dans la section 5.3.5 qu'elle donne des résultats très proches de la résolution numérique exacte de l'équation (5.53). Nous voyons alors que le seul terme supplémentaire qui intervient est $g \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}'\mathbf{Q}} \bar{\alpha}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}_{\mathbf{P}_1}\mathbf{q}'\mathbf{Q}} = \sum_{\mathbf{q}'\mathbf{Q}} \bar{H}_{\mathbf{P},\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}'\mathbf{Q}}$. Ce terme est nul par antisymétrie de \bar{H} et l'équation à l'ordre 2 est donc découplée du sous-espace avec 3 paires particule-trou. Ainsi, nous en déduisons que la correction au potentiel chimique de l'état lié apportée par l'ordre 3 est très petite et il s'avère inutile de la calculer en pratique. Un autre argument qui soutient cette prédiction est également la proximité entre nos résultats à l'ordre 2 et les simulations Monte-Carlo que nous avons déjà évoquée dans la section 5.3.5. Enfin, comme pour le polaron, nous pouvons effectuer l'approximation $\mathbf{q}_j = \mathbf{0}$ dans le facteur $\bar{E}^{(n)}$ à un ordre plus élevé n . Nous obtenons alors à nouveau un découplage des sous-espaces d'ordre supérieur. Cette procédure fournit donc naturellement une série d'approximations successives qui converge très rapidement et nous permet d'obtenir en pratique la solution exacte avec la précision souhaitée.

Conclusion et perspectives

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés aux gaz de fermions ultrafroids fortement polarisés, et plus particulièrement au problème à $N+1$ corps où un unique atome d'une espèce est immergé dans une mer de Fermi d'une autre espèce d'atome. Il s'agit à la fois d'une situation plus simple que le problème général d'un gaz polarisé, et hautement non triviale puisque les effets à N -corps jouent un rôle-clé dans la compréhension de ce système. Il intervient de plus dans la description précise des expériences.

Nous avons d'abord utilisé une approche hamiltonienne qui est basée sur un développement général de la fonction d'onde du système faisant intervenir un nombre arbitraire de paires particule-trou. Nous avons montré que la série d'approximations successives obtenues en se limitant à un nombre fini d'excitations converge très rapidement vers la solution exacte. Ainsi, à l'aide d'un calcul prenant en compte au plus deux paires particule-trou, nous avons obtenu une solution essentiellement exacte pour l'énergie et la masse effective du polaron. L'efficacité de cette approche a été confirmée par la proximité de ses résultats avec les calculs Monte-Carlo et les mesures expérimentales, notamment à l'unitarité lorsque l'interaction et les corrélations jouent un rôle majeur.

L'étude de la dimension 1 apporte une preuve supplémentaire de la rapidité de convergence de notre développement. Les deux situations des masses égales et de l'impureté de masse infinie ont été résolues analytiquement. La comparaison avec notre série d'approximations successives est excellente à la fois pour un potentiel attractif et dans la zone de répulsion faible. Nous avons également précisé la valeur du potentiel chimique et de la masse effective dans les différents cas limites, ainsi que l'influence du rapport des masses entre les deux espèces de spin.

L'étape suivante a été l'extension de notre théorie à la situation où un état lié apparaît entre l'impureté et un atome de l'espèce majoritaire. Nous avons pour cela utilisé le formalisme des diagrammes de Feynman. Une analyse détaillée des processus d'interaction nous a permis d'identifier les diagrammes les plus significatifs et d'aller au-delà de l'approximation usuelle de la matrice T . Pour le polaron, nous avons montré que la théorie diagrammatique que nous avons construite est équivalente à l'approche hamiltonienne. Elle fournit donc, dans ce cas, une solution essentiellement exacte. Cette approche diagrammatique est en outre particulièrement adaptée à la description d'un état lié, puisque celui-ci se manifeste simplement par la divergence du vertex d'interaction. Nous avons ainsi pu obtenir son potentiel chimique et sa masse effective. Comme pour le polaron, nous avons construit une série d'approximations successives dont la convergence vers la

solution exacte, à nouveau très rapide, a été parfaitement comprise. Ainsi, en ne retenant que les diagrammes avec au plus deux lignes de propagateurs explicites d'atomes de l'espèce majoritaire, nous obtenons une solution quasi-exacte. En particulier, dans la limite BEC, nous avons montré que nos équations sont équivalentes aux équations de Skorniakov et Ter-Martirosian décrivant l'interaction entre une molécule (qui est un boson composite) et un autre fermion. Nous avons également précisé la position de la transition entre le polaron et l'état lié.

Avec cette étude, nous avons donc obtenu une précision remarquable tout au long de la transition BEC-BCS. Cette précision va notamment au-delà de celle des calculs Monte-Carlo et de ce qu'on peut espérer mesurer expérimentalement. Il s'agit donc d'une des rares situations où il est possible d'obtenir une solution exacte pour un système à N -corps, en dimension 3, où les corrélations et les interactions sont fortes.

Une des extensions possibles de cette analyse est l'étude du problème à $N + M$ corps où le nombre M de fermions de l'espèce minoritaire devient de plus en plus grand $M = 2, 3, \dots$. En particulier, avec $M = 2$, il serait intéressant d'étudier l'interaction entre deux quasi-particules. Rappelons qu'une régression polynomiale des calculs Monte-Carlo réalisés avec une concentration arbitraire $x = N_{\downarrow}/N_{\uparrow}$ [PG08] a permis d'identifier à l'unitarité un terme d'ordre x^2 dans l'énergie totale. Ce terme peut effectivement être associé à une interaction entre polarons. Comme nous l'avons vu au cours de cette thèse, deux pistes possibles pourront être utilisées pour étudier ce problème. La première, basée sur une approche hamiltonienne, est particulièrement adaptée à la limite de couplage faible. Il est alors possible d'obtenir l'énergie du système à l'aide de la théorie des perturbations. Ainsi, un calcul à l'ordre 2 a été effectué récemment dans cette limite [MC10]. L'autre piste est l'utilisation du formalisme diagrammatique qui pourrait être généralisé à la situation où l'espèce minoritaire est composée de deux atomes. Indiquons que ces deux pistes sont en cours d'exploration.

Il serait également intéressant de préciser la nature de la transition entre le polaron et l'état lié. En effet, nos résultats ne nous permettent pas d'affirmer que la masse effective est discontinue à la transition. Une étude expérimentale pourrait permettre de répondre à la question. On peut aussi se demander quelle est l'influence de l'interaction entre quasi-particules sur la position de cette transition. Inversement, on peut s'interroger sur l'effet de cette transition sur l'interaction. Plus précisément, du côté polaron, la quasi-particule est de nature fermionique, alors que du côté état-lié, elle est attendue bosonique. Ce changement de statistique des quasi-particules peut donc amplifier ou réduire fortement leur interaction.

Fonctions de Green et diagrammes de Feynman

Dans cette appendice, nous montrons comment il est possible d'obtenir, à partir de la fonction de Green, le potentiel thermodynamique de l'état fondamental et l'énergie des excitations élémentaires. Nous donnons également la formulation générale du théorème de Wick et montrons pourquoi les diagrammes non connexes peuvent être omis.

A.1 Potentiel thermodynamique de l'état fondamental

Nous montrons ici qu'il est possible d'obtenir le potentiel thermodynamique Ω de l'état fondamental à l'aide de la seule fonction de Green G_σ lorsque l'Hamiltonien ne fait intervenir que des processus d'interaction à deux corps. Celui-ci est donné par :

$$\Omega \equiv \langle H - \mu_\uparrow \hat{N}_\uparrow - \mu_\downarrow \hat{N}_\downarrow \rangle = \langle \Psi_0 | H' | \Psi_0 \rangle. \quad (\text{A.1})$$

L'Hamiltonien dans l'ensemble grand canonique peut se décomposer sous la forme $H' = H'_0 + H_{\text{int}}$, où H'_0 correspond à l'opérateur d'énergie cinétique :

$$H'_0 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} (\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma}, \quad (\text{A.2})$$

et H_{int} est l'Hamiltonien d'interaction à deux corps que nous écrivons en toute généralité :

$$H_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma_i} V_{\sigma_i}(\mathbf{p}_i) c_{\mathbf{p}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{p}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{p}_3 \sigma_3} c_{\mathbf{p}_4 \sigma_4}. \quad (\text{A.3})$$

En remarquant que :

$$c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger [c_{\mathbf{p}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{p}_1 \sigma_1}, c_{\mathbf{p}\sigma}] = -\delta_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{p}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{p}_1 \sigma_1}, \quad (\text{A.4})$$

nous obtenons, après multiplication par $(\varepsilon_{\sigma_1}(\mathbf{p}_1) - \mu_{\sigma_1})$ et sommation sur \mathbf{p}_1, σ_1 et \mathbf{p}, σ :

$$\sum_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger [H'_0, c_{\mathbf{p}\sigma}] = -H'_0. \quad (\text{A.5})$$

De la même manière, la relation :

$$c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger [c_{\mathbf{p}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{p}_2\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{p}_3\sigma_3} c_{\mathbf{p}_4\sigma_4}, c_{\mathbf{p}\sigma}] = -(\delta_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}_1\sigma_1} + \delta_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}_2\sigma_2}) c_{\mathbf{p}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{p}_2\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{p}_3\sigma_3} c_{\mathbf{p}_4\sigma_4}, \quad (\text{A.6})$$

nous donne :

$$\sum_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger [H_{\text{int}}, c_{\mathbf{p}\sigma}] = -2H_{\text{int}}. \quad (\text{A.7})$$

Ainsi, en sommant les équations (A.5) et (A.7), nous trouvons la relation :

$$\sum_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger [H', c_{\mathbf{p}\sigma}] = -H'_0 - 2H_{\text{int}}, \quad (\text{A.8})$$

que nous pouvons écrire sous la forme :

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \left(H'_0 + \sum_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger [H', c_{\mathbf{p}\sigma}] \right). \quad (\text{A.9})$$

La valeur moyenne de l'énergie cinétique est obtenue à partir du nombre d'occupation $n_{\sigma\mathbf{p}}$ (cf. équation (4.40)) :

$$\langle H'_0 \rangle = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} (\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma) n_{\sigma\mathbf{p}} = -i \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} G_\sigma(\mathbf{p}, \omega) [\varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma]. \quad (\text{A.10})$$

Nous pouvons exprimer la valeur moyenne $\langle c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger [H', c_{\mathbf{p}\sigma}] \rangle$ à l'aide de la densité spectrale, en introduisant la relation de fermeture $\sum_\beta |\Psi_\beta^{(N-1)}\rangle \langle \Psi_\beta^{(N-1)}|$, comme nous l'avons fait pour obtenir la représentation spectrale de G_σ (cf. équation (4.16)). Nous trouvons :

$$\langle \Psi_0 | c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger [H', c_{\mathbf{p}\sigma}] | \Psi_0 \rangle = \sum_\beta \left| \langle \Psi_\beta^{(N-1)} | c_{\mathbf{p}\sigma} | \Psi_0 \rangle \right|^2 \varepsilon_\beta^{(-)} = - \int_{-\infty}^0 d\omega A_\sigma(\mathbf{p}, \omega) \omega = - \frac{\partial G_\sigma}{\partial t}(\mathbf{p}, 0^-), \quad (\text{A.11})$$

où la dernière égalité provient de l'équation (4.22). En revenant à la définition de la transformée de Fourier de G_σ , nous obtenons finalement :

$$\langle H_{\text{int}} \rangle = -\frac{i}{2} \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} G_\sigma(\mathbf{p}, \omega) G_{0\sigma}^{-1}(\mathbf{p}, \omega), \quad (\text{A.12})$$

où nous avons utilisé la fonction de Green libre $G_{0\sigma}^{-1}(\mathbf{p}, \omega) = [\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) + \mu_\sigma]$. Le potentiel thermodynamique de l'état fondamental s'écrit alors :

$$\Omega = -\frac{i}{2} \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} G_\sigma(\mathbf{p}, \omega) [\omega + \varepsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu_\sigma]. \quad (\text{A.13})$$

A.2 Excitations élémentaires et pôles de G

Nous montrons maintenant que l'énergie et la durée de vie des excitations élémentaires sont données par les pôles du prolongement de la fonction de Green. Pour cela, revenons au calcul que nous avons effectué à la fin de la section 4.1.2 lorsque la densité spectrale est une lorentzienne centrée en $\xi_{\mathbf{p}}$ et de largeur $2\Gamma_{\mathbf{p}}$ (cf. équation (4.34)). Nous avons obtenu $G_R(\mathbf{p}, \omega) = [\omega - \xi_{\mathbf{p}} + i\Gamma_{\mathbf{p}}]^{-1}$ et $G_A(\mathbf{p}, \omega) = [\omega - \xi_{\mathbf{p}} - i\Gamma_{\mathbf{p}}]^{-1}$. Calculons l'évolution temporelle de la fonction de Green correspondante à l'aide de l'équation (4.22). Supposons tout d'abord $\xi_{\mathbf{p}} > 0$. Pour $t > 0$, nous avons alors :

$$iG(\mathbf{p}, t) = \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\Gamma_{\mathbf{p}}/\pi}{(\omega - \xi_{\mathbf{p}})^2 + \Gamma_{\mathbf{p}}^2} e^{-i\omega t}. \quad (\text{A.14})$$

Cette intégrale est effectuée en déformant le chemin C_1 en C'_1 représentés sur la figure A.1.

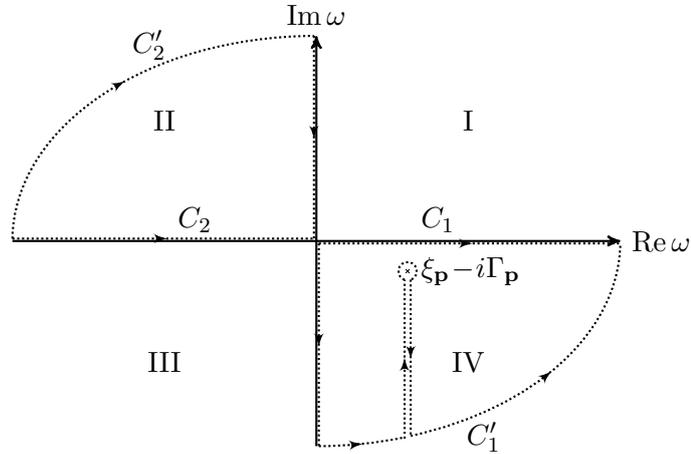


FIG. A.1: Chemins utilisés pour le calcul de $G(\mathbf{p}, t)$.

L'arc à l'infini ne contribue pas, il reste seulement la contribution du pôle $\omega = \xi_{\mathbf{p}} - i\Gamma_{\mathbf{p}}$ dans le quadrant IV (qui est aussi le pôle de $G_R(\mathbf{p}, \omega)$) et l'intégrale de 0 à $-i\infty$. Nous obtenons :

$$iG(\mathbf{p}, t) = e^{-i\xi_{\mathbf{p}}t - \Gamma_{\mathbf{p}}t} - i \int_0^{+\infty} du \frac{\Gamma_{\mathbf{p}}/\pi}{(\xi_{\mathbf{p}} + iu)^2 + \Gamma_{\mathbf{p}}^2} e^{-ut}. \quad (\text{A.15})$$

En supposant $t\xi_{\mathbf{p}} \gg 1$ et $t\Gamma_{\mathbf{p}} \lesssim 1$ (ce qui implique $\Gamma_{\mathbf{p}} \ll \xi_{\mathbf{p}}$), il est facile de montrer que la dernière intégrale est négligeable [AGD76], nous avons donc :

$$iG(\mathbf{p}, t) \approx e^{-i\xi_{\mathbf{p}}t - \Gamma_{\mathbf{p}}t}, \quad t > 0. \quad (\text{A.16})$$

Pour $t < 0$, nous avons :

$$-iG(\mathbf{p}, t) = \int_{-\infty}^0 d\omega \frac{\Gamma_{\mathbf{p}}/\pi}{(\omega - \xi_{\mathbf{p}})^2 + \Gamma_{\mathbf{p}}^2} e^{-i\omega t}. \quad (\text{A.17})$$

Comme il n'y a pas de pôle dans le quadrant II, en déformant le chemin C_2 en C'_2 représentés sur la figure A.1 et en supposant à nouveau $|t|\xi_{\mathbf{p}} \gg 1$ et $|t|\Gamma_{\mathbf{p}} \lesssim 1$, nous

obtenons :

$$-iG(\mathbf{p}, t) = -i \int_0^{+\infty} du \frac{\Gamma_{\mathbf{p}}/\pi}{(\xi_{\mathbf{p}} - iu)^2 + \Gamma_{\mathbf{p}}^2} e^{-u|t|} \approx 0, \quad t > 0. \quad (\text{A.18})$$

En utilisant l'interprétation physique de la fonction de Green donnée dans la section 4.1.1, et par analogie avec la fonction de Green sans interaction donnée par l'équation (4.8), nous en déduisons que les évolutions temporelles (A.16) et (A.18) correspondent à la propagation d'une quasi-particule (état excité à $(N + 1)$ particules) d'énergie $\xi_{\mathbf{p}} > 0$ et de durée de vie $1/\Gamma_{\mathbf{p}}$.

Nous pouvons effectuer la même étude lorsque $\xi_{\mathbf{p}} < 0$. La contribution principale provient alors du pôle de $G_A(\mathbf{p}, \omega)$ situé dans le quadrant II, $\omega = \xi_{\mathbf{p}} + i\Gamma_{\mathbf{p}}$:

$$-iG(\mathbf{p}, t) \approx e^{-i\xi_{\mathbf{p}}t + \Gamma_{\mathbf{p}}t} \theta(-t), \quad (\text{A.19})$$

correspondant à la propagation d'un quasi-trou (état excité à $(N - 1)$ particules) d'énergie $\xi_{\mathbf{p}} < 0$ et de durée de vie $1/\Gamma_{\mathbf{p}}$.

De manière générale, la fonction de Green d'un système, ou plutôt ses prolongements analytiques G_R et G_A , auront des pôles dans les quadrants II et IV. Nous admettrons par définition que la fonction de Green d'un système normal n'a qu'un pôle par valeur de \mathbf{p} . Elle peut donc s'écrire sous la forme :

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \frac{z_p}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} \pm i\Gamma_{\mathbf{p}}} + G_{\text{inc}}(\mathbf{p}, \omega), \quad (\text{A.20})$$

où z_p est le résidu au pôle, le signe $+$ correspond à $\omega > 0$ et le signe $-$ à $\omega < 0$, et la partie incohérente de la fonction de Green G_{inc} n'a pas de pôle. L'évolution temporelle de G correspond alors à la propagation d'une quasi-particule si $\xi_{\mathbf{p}} > 0$ ou d'un quasi-trou si $\xi_{\mathbf{p}} < 0$, de durée de vie $\Gamma_{\mathbf{p}} \geq 0$ et de poids $z_p \in [0, 1]$. La densité spectrale se décompose également en deux parties :

$$A(\mathbf{p}, \omega) = z_p \frac{\Gamma_{\mathbf{p}}/\pi}{(\omega - \xi_{\mathbf{p}})^2 + \Gamma_{\mathbf{p}}^2} + A_{\text{inc}}(\mathbf{p}, \omega). \quad (\text{A.21})$$

Le premier terme est la signature de l'excitation élémentaire : c'est un pic centré en $\xi_{\mathbf{p}}$, de largeur $2\Gamma_{\mathbf{p}}$ et de poids z_p . Le deuxième terme de norme $1 - z_p$ correspond au fond continu incohérent.

A.3 Théorème de Wick

Nous souhaitons calculer les valeurs moyennes, pour un système sans interaction, de produits ordonnés d'opérateurs de la forme :

$$\langle T A_1(\tau_1) A_2(\tau_2) \cdots A_n(\tau_n) \rangle_0, \quad (\text{A.22})$$

où les $A_i(\tau_i)$ sont des opérateurs de création $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau)$ ou de destruction $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau)$ en représentation de Matsubara. Si $A_i(\tau_i) = \hat{c}_{\mathbf{p}_i\sigma_i}^\dagger(\tau_i)$, nous posons $\lambda_i = 1$ et si $A_i(\tau_i) = \hat{c}_{\mathbf{p}_i\sigma_i}(\tau_i)$,

nous posons $\lambda_i = -1$. La conservation du nombre de particules montre que cette valeur moyenne est non nulle seulement si elle fait intervenir le même nombre d'opérateurs de destruction et de création ; en particulier, le nombre d'opérateurs n doit être pair.

Le théorème de Wick exprime cette valeur moyenne à l'aide des valeurs moyennes de deux opérateurs seulement, appelées contractions :

$$\langle TA_1(\tau_1)A_2(\tau_2)\cdots A_{2n}(\tau_{2n})\rangle_0 = \sum_{\{i_k, j_k\}} \varepsilon(\sigma) \langle TA_{i_1}(\tau_{i_1})A_{j_1}(\tau_{j_1})\rangle_0 \cdots \langle TA_{i_n}(\tau_{i_n})A_{j_n}(\tau_{j_n})\rangle_0, \quad (\text{A.23})$$

où la somme s'effectue sur toutes les partitions en couples de l'ensemble $\{1, \dots, 2n\} = \bigsqcup_{k=1}^n \{i_k, j_k\}$ que nous ordonnons de manière unique en imposant $i_k < j_k$ et $i_1 < i_2 < \dots < i_n$ et $\varepsilon(\sigma)$ est la signature de la permutation qui fait passer de $\{1, 2, \dots, 2n-1, 2n\}$ à $\{i_1, j_1, \dots, i_n, j_n\}$. Il s'agit d'un résultat classique qui s'applique ici parce que les valeurs moyennes que nous calculons font intervenir l'Hamiltonien libre H'_0 qui est quadratique en $c_{\mathbf{p}\sigma}$ et $c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger$ et les opérateurs $A_i(\tau_i)$ sont proportionnels à ces mêmes opérateurs. En effet, l'équation (4.83) montre que :

$$A_i(\tau_i) = e^{\lambda_i(\varepsilon_{\sigma_i}(\mathbf{p}_i) - \mu_{\sigma_i})\tau_i} A_i(0), \text{ avec } A_i(0) = c_{\mathbf{p}_i\sigma_i} \text{ ou } c_{\mathbf{p}_i\sigma_i}^\dagger. \quad (\text{A.24})$$

Nous renvoyons par exemple à [FW71] pour une démonstration de ce théorème.

Un dénombrement rapide montre que la somme sur les contractions possède a priori $(2n)!/2^n n!$ termes. Cependant, comme dans chaque valeur moyenne nous devons avoir le même nombre d'opérateurs de destruction et de création, les opérateurs A_{i_k} et A_{j_k} ne doivent pas être du même type et la somme possède au plus $n!$ termes non nuls. Enfin, la contraction de deux opérateurs s'exprime simplement à l'aide de la fonction de Green libre que nous avons calculée dans la section 4.1.5 :

$$\langle TA_i(\tau_i)A_j(\tau_j)\rangle_0 = -\lambda_j \delta_{\lambda_i, -\lambda_j} \delta_{\mathbf{p}_i\sigma_i, \mathbf{p}_j\sigma_j} \mathcal{G}_{0\sigma_i}(\mathbf{p}_i, \lambda_j(\tau_i - \tau_j)). \quad (\text{A.25})$$

En pratique, le facteur $\delta_{\sigma_i\sigma_j}$ réduit à nouveau le nombre de termes non nuls intervenant dans la somme (A.23).

A.4 Élimination des diagrammes non connexes

Nous montrons maintenant que les diagrammes non connexes sont exactement compensés par le facteur $\langle U(\beta)\rangle_0$ du dénominateur de \mathcal{G}_σ (cf. équation (4.87)). Un terme obtenu par application du théorème de Wick au calcul du numérateur de la fonction de Green \mathcal{G}_σ :

$$\langle T\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau')U(\beta)\rangle_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle T\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau')\hat{H}_{\text{int}}(\tau_1)\cdots\hat{H}_{\text{int}}(\tau_n)\rangle_0, \quad (\text{A.26})$$

correspondra à un diagramme connexe si les contractions ne laissent aucun opérateur ou groupe d'opérateurs $\hat{H}_{\text{int}}(\tau_i)$ isolés. Ainsi, pour un diagramme de Feynman non connexe, un certain nombre d'opérateurs $\hat{H}_{\text{int}}(\tau_i)$ sont connectés aux opérateurs $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau)$ et $\hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau')$,

alors que les autres sont isolés. Il est donc obtenu à partir de l'expression :

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_m \langle T \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau') \hat{H}_{\text{int}}(\tau_1) \cdots \hat{H}_{\text{int}}(\tau_m) \rangle_{\text{con}} \\ & \times \int_0^\beta d\tau_{m+1} \cdots d\tau_n \langle T \hat{H}_{\text{int}}(\tau_{m+1}) \cdots \hat{H}_{\text{int}}(\tau_n) \rangle_0, \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

où $\langle \cdots \rangle_{\text{con}}$ signifie que nous devons évaluer la valeur moyenne à l'aide du théorème de Wick en ne laissant aucun facteur $H_{\text{int}}(\tau_i)$ isolé. Parmi tous les diagrammes non connexes de ce type qui interviennent dans \mathcal{G}_σ , plusieurs donnent exactement la même contribution : ils correspondent simplement à une redistribution des $H_{\text{int}}(\tau_i)$ entre $\langle \cdots \rangle_{\text{con}}$ et $\langle \cdots \rangle_0$. Il y en a $n!/(m!(n-m)!)$ et la contribution totale de tous ces diagrammes est donc :

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_m \langle T \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau') \hat{H}_{\text{int}}(\tau_1) \cdots \hat{H}_{\text{int}}(\tau_m) \rangle_{\text{con}} \\ & \times \frac{(-1)^{n-m}}{(n-m)!} \int_0^\beta d\tau_{m+1} \cdots d\tau_n \langle T \hat{H}_{\text{int}}(\tau_{m+1}) \cdots \hat{H}_{\text{int}}(\tau_n) \rangle_0. \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Nous pouvons désormais sommer les différentes contributions correspondant à un nombre quelconque d'opérateurs isolés. Nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_m \langle T \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau') \hat{H}_{\text{int}}(\tau_1) \cdots \hat{H}_{\text{int}}(\tau_m) \rangle_{\text{con}} \\ & \times \left[1 - \int_0^\beta d\tau_{m+1} \langle T \hat{H}_{\text{int}}(\tau_{m+1}) \rangle_0 + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_{m+1} d\tau_{m+2} \langle T \hat{H}_{\text{int}}(\tau_{m+1}) \hat{H}_{\text{int}}(\tau_{m+2}) \rangle_0 - \cdots \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Le facteur entre crochet est exactement la valeur moyenne de $U(\beta)$ obtenue à l'aide du développement perturbatif (4.86). Il compense donc le facteur $\langle U(\beta) \rangle_0$ du dénominateur de \mathcal{G}_σ . Ainsi, la contribution à l'ordre n de \mathcal{G}_σ est donnée par :

$$\delta \mathcal{G}_\sigma^{(n)} = -\frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle T \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(\tau') \hat{H}_{\text{int}}(\tau_1) \cdots \hat{H}_{\text{int}}(\tau_n) \rangle_{\text{con}}. \quad (\text{A.30})$$

Nous pouvons encore simplifier cette expression en remarquant que plusieurs diagrammes donnent la même contribution : ceux-ci correspondent simplement à une permutation des $H_{\text{int}}(\tau_i)$ lorsque nous effectuons les contractions. Il y en a $n!$. Ainsi, pour évaluer la fonction de Green à l'ordre n , nous devons dessiner tous les diagrammes connexes non topologiquement équivalents et calculer l'expression correspondante en omettant le facteur $1/n!$ dans l'équation (A.30).

Bibliographie

- [ABCG04] G. E. ASTRAKHARCHIK, J. BORONAT, J. CASULLERAS ET S. GIORGINI, *Equation of State of a Fermi Gas in the BEC-BCS Crossover : A Quantum Monte Carlo Study*, Phys. Rev. Lett. **93**, 200404 (2004).
- [ABGP04] G. E. ASTRAKHARCHIK, D. BLUME, S. GIORGINI ET L. P. PITAEVSKII, *Interacting Fermions in Highly Elongated Harmonic Traps*, Phys. Rev. Lett. **93**, 050402 (2004).
- [AER⁺66] A. C. ANDERSON, D. O. EDWARDS, W. R. ROACH, R. E. SARWINSKI ET J. C. WHEATLEY, *Thermal and Magnetic Properties of Dilute Solutions of He3 in He4 at Low Temperatures*, Phys. Rev. Lett. **17**, 367 (1966).
- [AGD76] A. A. ABRIKOSOV, L. P. GORKOV ET I. E. DZYALOSHINSKI, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, New York, 1976).
- [BAR⁺05] M. BARTENSTEIN, A. ALTMAYER, S. RIEDL, R. GEURSEN, S. JOCHIM, C. CHIN, J. H. DENSCHLAG, R. GRIMM, A. SIMONI, E. TIESINGA, C. J. WILLIAMS ET P. S. JULIENNE, *Precise Determination of Li6 Cold Collision Parameters by Radio-Frequency Spectroscopy on Weakly Bound Molecules*, Phys. Rev. Lett. **94**, 103201 (2005).
- [BBP67] J. BARDEEN, G. BAYM ET D. PINES, *Effective Interaction of He3 Atoms in Dilute Solutions of He3 in He4 at Low Temperatures*, Phys. Rev. **156**, 207 (1967).
- [BCK⁺03] T. BOURDEL, J. CUBIZOLLES, L. KHAYKOVICH, K. M. F. MAGALHAES, S. J. J. M. F. KOKKELMANS, G. V. SHLYAPNIKOV ET C. SALOMON, *Measurement of the Interaction Energy near a Feshbach Resonance in a Li6 Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **91**, 020402 (2003).
- [BCS57] J. BARDEEN, L. N. COOPER ET J. R. SCHRIEFFER, *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [BDM06] A. BULGAC, J. E. DRUT ET P. MAGIERSKI, *Spin 1/2 Fermions in the Unitary Regime : A Superfluid of a New Type*, Phys. Rev. Lett. **96**, 090404 (2006).
- [BF07] A. BULGAC ET M. M. FORBES, *Zero-temperature thermodynamics of asymmetric Fermi gases at unitarity*, Phys. Rev. A **75**, 031605 (2007).

- [BG09] G. BERTAINA ET S. GIORGINI, *Density profiles of polarized Fermi gases confined in harmonic traps*, Phys. Rev. A **79**, 013616 (2009).
- [BKK⁺06] I. V. BRODSKY, M. Y. KAGAN, A. V. KLAPTSOV, R. COMBESCOT ET X. LEYRONAS, *Exact diagrammatic approach for dimer-dimer scattering and bound states of three and four resonantly interacting particles*, Phys. Rev. A **73**, 032724 (2006).
- [BKP⁺08] E. BUROVSKI, E. KOZIK, N. V. PROKOF'EV, B. V. SVISTUNOV ET M. TROYER, *Critical Temperature Curve in BEC-BCS Crossover*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090402 (2008).
- [BM10] G. M. BRUUN ET P. MASSIGNAN, *Decay of polarons and molecules in a strongly polarized Fermi gas* (2010), arXiv:1003.0801.
- [BMO03] T. BERGEMAN, M. G. MOORE ET M. OLSHANII, *Atom-Atom Scattering under Cylindrical Harmonic Confinement : Numerical and Analytic Studies of the Confinement Induced Resonance*, Phys. Rev. Lett. **91**, 163201 (2003).
- [BPST06] E. BUROVSKI, N. V. PROKOF'EV, B. V. SVISTUNOV ET M. TROYER, *Critical Temperature and Thermodynamics of Attractive Fermions at Unitarity*, Phys. Rev. Lett. **96**, 160402 (2006).
- [BRS09] I. BAUSMERTH, A. RECATI ET S. STRINGARI, *Chandrasekhar-Clogston limit and phase separation in Fermi mixtures at unitarity*, Phys. Rev. A **79**, 043622 (2009).
- [BvK98] P. F. BEDAQUE ET U. VAN KOLCK, *Nucleon-deuteron scattering from an effective field theory*, Phys. Lett. B **428**, 221 (1998).
- [CAL09] R. COMBESCOT, F. ALZETTO ET X. LEYRONAS, *Particle distribution tail and related energy formula*, Phys. Rev. A **79**, 053640 (2009).
- [CG08] R. COMBESCOT ET S. GIRAUD, *Normal State of Highly Polarized Fermi Gases : Full Many-Body Treatment*, Phys. Rev. Lett. **101**, 050404 (2008).
- [CGJT10] C. CHIN, R. GRIMM, P. JULIENNE ET E. TIESINGA, *Feshbach resonances in ultracold gases*, Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).
- [CGL09] R. COMBESCOT, S. GIRAUD ET X. LEYRONAS, *Analytical theory of the dressed bound state in highly polarized Fermi gases*, Europhys. Lett. **88**, 60007 (2009).
- [Cha62] B. S. CHANDRASEKHAR, *A note on the maximum critical field of high-field superconductors*, Appl. Phys. Lett. **1**, 7 (1962).
- [Che06] F. CHEVY, *Universal phase diagram of a strongly interacting Fermi gas with unbalanced spin populations*, Phys. Rev. A **74**, 063628 (2006).
- [Che09] F. CHEVY, *Swimming in the Fermi sea*, Physics **2**, 48 (2009).
- [Clo62] A. M. CLOGSTON, *Upper Limit for the Critical Field in Hard Superconductors*, Phys. Rev. Lett. **9**, 266 (1962).
- [CM10] F. CHEVY ET C. MORA, *Ultra-cold Polarized Fermi Gases* (2010), arXiv:1003.0801.

- [Com01] R. COMBESCOT, *BCS superfluidity in ultracold gases with unequal atomic populations*, Europhys. Lett. **55**, 150 (2001).
- [Com03] R. COMBESCOT, *Feshbach Resonance in Dense Ultracold Fermi Gases*, Phys. Rev. Lett. **91**, 120401 (2003).
- [Com08] R. COMBESCOT, *Introduction to FFLO phases and collective mode in the BEC-BCS crossover*, in Ultra-cold Fermi Gases, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Course CLXIV, Varenna, 20 - 30 June 2006, édité par M. Inguscio, W. Ketterle et C. Salomon (IOS Press, Amsterdam), pages 697 – 714 (2008), arXiv:cond-mat/0702399.
- [CR05] J. CARLSON ET S. REDDY, *Asymmetric Two-Component Fermion Systems in Strong Coupling*, Phys. Rev. Lett. **95**, 060401 (2005).
- [CRLC07] R. COMBESCOT, A. RECATI, C. LOBO ET F. CHEVY, *Normal State of Highly Polarized Fermi Gases : Simple Many-Body Approaches*, Phys. Rev. Lett. **98**, 180402 (2007).
- [CTDL73] C. COHEN-TANNOUJJI, B. DIU ET F. LALOE, *Mécanique Quantique* (Hermann, Paris, 1973).
- [DJ99] B. DEMARCO ET D. S. JIN, *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*, Science **285**, 1703 (1999).
- [DSM06] T. N. DE SILVA ET E. J. MUELLER, *Profiles of near-resonant population-imbalanced trapped Fermi gases*, Phys. Rev. A **73**, 051602 (2006).
- [Eag69] D. M. EAGLES, *Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin-Film Superconducting Semiconductors*, Phys. Rev. **186**, 456 (1969).
- [FF64] P. FULDE ET R. A. FERRELL, *Superconductivity in a Strong Spin-Exchange Field*, Phys. Rev. **135**, A550 (1964).
- [FL67] M. FLICKER ET E. H. LIEB, *Delta-Function Fermi Gas with Two-Spin Deviates*, Phys. Rev. **161**, 179 (1967).
- [FRZ04] J. N. FUCHS, A. RECATI ET W. ZWERGER, *Exactly Solvable Model of the BCS-BEC Crossover*, Phys. Rev. Lett. **93**, 090408 (2004).
- [FW71] A. L. FETTER ET J. D. WALECKA, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Mcgraw-Hill College, New York, 1971).
- [Gau67] M. GAUDIN, *Un système à une dimension de fermions en interaction*, Phys. Lett. A **24**, 55 (1967).
- [GC09] S. GIRAUD ET R. COMBESCOT, *Highly polarized Fermi gases : One-dimensional case*, Phys. Rev. A **79**, 043615 (2009).
- [GC10a] S. GIRAUD ET R. COMBESCOT, *Comment on "Motion of an impurity particle in an ultracold quasi-one-dimensional gas of hard-core bosons"* (2010), arXiv:1002.4366.
- [GC10b] S. GIRAUD ET R. COMBESCOT, *The dressed bound state in highly polarized Fermi gases* (2010), en préparation.

- [GM09] M. D. GIRARDEAU ET A. MINGUZZI, *Motion of an impurity particle in an ultracold quasi-one-dimensional gas of hard-core bosons*, Phys. Rev. A **79**, 033610 (2009).
- [GMB61] L. P. GORKOV ET T. K. MELIK-BARKHUDAROV, *Contribution to the theory of superfluidity in an imperfect Fermi gas*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **40**, 1452 (1961), [Sov. Phys. JETP **13**, 1018 (1961)].
- [GPS08] S. GIORGINI, L. P. PITAEVSKII ET S. STRINGARI, *Theory of ultracold atomic Fermi gases*, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).
- [GRJ03] M. GREINER, C. A. REGAL ET D. S. JIN, *Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas*, Nature **426**, 537 (2003).
- [Hau93] R. HAUSSMANN, *Crossover from BCS superconductivity to Bose-Einstein condensation : A self-consistent theory*, Z. Phys. B : Condens. Matter **91**, 291 (1993).
- [HLD07] H. HU, X.-J. LIU ET P. D. DRUMMOND, *Phase Diagram of a Strongly Interacting Polarized Fermi Gas in One Dimension*, Phys. Rev. Lett. **98**, 070403 (2007).
- [HRCZ07] R. HAUSSMANN, W. RANTNER, S. CERRITO ET W. ZWERGER, *Thermodynamics of the BCS-BEC crossover*, Phys. Rev. A **75**, 023610 (2007).
- [JC02] O. JUILLET ET P. CHOMAZ, *Exact Stochastic Mean-Field Approach to the Fermionic Many-Body Problem*, Phys. Rev. Lett. **88**, 142503 (2002).
- [Jui07] O. JUILLET, *Sign-free stochastic mean-field approach to strongly correlated phases of ultracold fermions*, New J. Phys. **9**, 163 (2007).
- [KK68] L. V. KELDYSH ET A. N. KOZLOV, *Collective properties of excitons in semiconductors*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **54**, 978 (1968), [Sov. Phys. JETP **27**, 521 (1968)].
- [KZ08] W. KETTERLE ET M. W. ZWIERLEIN, *Making, probing and understanding ultracold Fermi gases*, in Ultra-cold Fermi Gases, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Course CLXIV, Varenna, 20 - 30 June 2006, édité par M. Inguscio, W. Ketterle et C. Salomon (IOS Press, Amsterdam), pages 95 – 287 (2008), arXiv:0801.2500.
- [Lan33] L. LANDAU, *Über die bewegung der elektronen in kristallgitter*, Phys. Z. Sowjetunion **3**, 664 (1933).
- [LC07] X. LEYRONAS ET R. COMBESCOT, *Superfluid Equation of State of Dilute Composite Bosons*, Phys. Rev. Lett. **99**, 170402 (2007).
- [Leg80] A. J. LEGGETT, *Cooper pairing in spin-polarized Fermi systems*, J. Phys. Colloques **41**, 19 (1980).
- [LHY57] T. D. LEE, K. HUANG ET C. N. YANG, *Eigenvalues and Eigenfunctions of a Bose System of Hard Spheres and Its Low-Temperature Properties*, Phys. Rev. **106**, 1135 (1957).
- [LL96] L. LANDAU ET E. LIFSHITZ, *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory (Course of Theoretical Physics, Volume 3)* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1996).

- [LO64] A. I. LARKIN ET Y. N. OVCHINNIKOV, *Nonuniform state of superconductors*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 1136 (1964), [Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965)].
- [LRGS06] C. LOBO, A. RECATI, S. GIORGINI ET S. STRINGARI, *Normal State of a Polarized Fermi Gas at Unitarity*, Phys. Rev. Lett. **97**, 200403 (2006).
- [LRP⁺09] Y.-A. LIAO, A. S. C. RITTNER, T. PAPROTTA, W. LI, G. B. PARTRIDGE, R. G. HULET, S. K. BAUR ET E. J. MUELLER, *Spin-Imbalance in a One-Dimensional Fermi Gas* (2009), arXiv:0912.0092.
- [Lut61] J. M. LUTTINGER, *Analytic Properties of Single-Particle Propagators for Many-Fermion Systems*, Phys. Rev. **121**, 942 (1961).
- [MC09] C. MORA ET F. CHEVY, *Ground state of a tightly bound composite dimer immersed in a Fermi sea*, Phys. Rev. A **80**, 033607 (2009).
- [MC10] C. MORA ET F. CHEVY, *The normal phase of an imbalanced Fermi gas* (2010), arXiv:1003.0213.
- [McG65] J. B. MCGUIRE, *Interacting Fermions in One Dimension. I. Repulsive Potential*, J. Math. Phys. **6**, 432 (1965).
- [McG66] J. B. MCGUIRE, *Interacting Fermions in One Dimension. II. Attractive Potential*, J. Math. Phys. **7**, 123 (1966).
- [MKEG05] C. MORA, A. KOMNIK, R. EGGER ET A. O. GOGOLIN, *Four-Body Problem and BEC-BCS Crossover in a Quasi-One-Dimensional Cold Fermion Gas*, Phys. Rev. Lett. **95**, 080403 (2005).
- [NNCS10] N. NAVON, S. NASCIMBÈNE, F. CHEVY ET C. SALOMON, *The Equation of State of a Low-Temperature Fermi Gas with Tunable Interactions*, Science **328**, 729 (2010).
- [NNJ⁺09] S. NASCIMBÈNE, N. NAVON, K. J. JIANG, L. TARRUELL, M. TEICHMANN, J. MCKEEVER, F. CHEVY ET C. SALOMON, *Collective Oscillations of an Imbalanced Fermi Gas : Axial Compression Modes and Polaron Effective Mass*, Phys. Rev. Lett. **103**, 170402 (2009).
- [NNJ⁺10] S. NASCIMBÈNE, N. NAVON, K. J. JIANG, F. CHEVY ET C. SALOMON, *Exploring the thermodynamics of a universal Fermi gas*, Nature **463**, 1057 (2010).
- [NSR85] P. NOZIÈRES ET S. SCHMITT-RINK, *Bose condensation in an attractive fermion gas : From weak to strong coupling superconductivity*, J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985).
- [Ols98] M. OLSHANII, *Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons*, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).
- [Ors07] G. ORSO, *Attractive Fermi Gases with Unequal Spin Populations in Highly Elongated Traps*, Phys. Rev. Lett. **98**, 070402 (2007).
- [PC04] L. PRICOUPENKO ET Y. CASTIN, *One particle in a box : The simplest model for a Fermi gas in the unitary limit*, Phys. Rev. A **69**, 051601 (2004).

- [PDZ09] M. PUNK, P. T. DUMITRESCU ET W. ZWERGER, *Polaron-to-molecule transition in a strongly imbalanced Fermi gas*, Phys. Rev. A **80**, 053605 (2009).
- [Pek54] S. I. PEKAR, *Untersuchungen über die Elektronentheorie der Kristalle* (Akademie-Verlag, Berlin, 1954).
- [Pet03] D. S. PETROV, *Three-body problem in Fermi gases with short-range inter-particle interaction*, Phys. Rev. A **67**, 010703 (2003).
- [PG08] S. PILATI ET S. GIORGINI, *Phase Separation in a Polarized Fermi Gas at Zero Temperature*, Phys. Rev. Lett. **100**, 030401 (2008).
- [PLK⁺06] G. B. PARTRIDGE, W. LI, R. I. KAMAR, Y.-A. LIAO ET R. G. HULET, *Pairing and Phase Separation in a Polarized Fermi Gas*, Science **311**, 503 (2006).
- [PLL⁺06] G. B. PARTRIDGE, W. LI, Y. A. LIAO, R. G. HULET, M. HAQUE ET H. T. C. STOOF, *Deformation of a Trapped Fermi Gas with Unequal Spin Populations*, Phys. Rev. Lett. **97**, 190407 (2006).
- [PMLS07a] M. M. PARISH, F. M. MARCHETTI, A. LAMACRAFT ET B. D. SIMONS, *Finite-temperature phase diagram of a polarized Fermi condensate*, Nature Physics **3**, 124 (2007).
- [PMLS07b] M. M. PARISH, F. M. MARCHETTI, A. LAMACRAFT ET B. D. SIMONS, *Polarized Fermi Condensates with Unequal Masses : Tuning the Tricritical Point*, Phys. Rev. Lett. **98**, 160402 (2007).
- [Pop66] V. N. POPOV, *Theory of a Bose gas produced by bound states of Fermi particles*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **50**, 1550 (1966), [Sov. Phys. JETP **23**, 1034 (1966)].
- [PPS04] A. PERALI, P. PIERI ET G. C. STRINATI, *Quantitative Comparison between Theoretical Predictions and Experimental Results for the BCS-BEC Crossover*, Phys. Rev. Lett. **93**, 100404 (2004).
- [PS00] P. PIERI ET G. C. STRINATI, *Strong-coupling limit in the evolution from BCS superconductivity to Bose-Einstein condensation*, Phys. Rev. B **61**, 15370 (2000).
- [PS01] C. J. PETHICK ET H. SMITH, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, 2001).
- [PS08a] N. V. PROKOF'EV ET B. V. SVISTUNOV, *Bold diagrammatic Monte Carlo : A generic sign-problem tolerant technique for polaron models and possibly interacting many-body problems*, Phys. Rev. B **77**, 125101 (2008).
- [PS08b] N. V. PROKOF'EV ET B. V. SVISTUNOV, *Fermi-polaron problem : Diagrammatic Monte Carlo method for divergent sign-alternating series*, Phys. Rev. B **77**, 020408 (2008).
- [PSS04] D. S. PETROV, C. SALOMON ET G. V. SHLYAPNIKOV, *Weakly Bound Dimers of Fermionic Atoms*, Phys. Rev. Lett. **93**, 090404 (2004).

- [PSS05] D. S. PETROV, C. SALOMON ET G. V. SHLYAPNIKOV, *Scattering properties of weakly bound dimers of fermionic atoms*, Phys. Rev. A **71**, 012708 (2005).
- [PWY06a] C.-H. PAO, S.-T. WU ET S.-K. YIP, *Erratum : Superfluid stability in the BEC-BCS crossover [Phys. Rev. B 73, 132506 (2006)]*, Phys. Rev. B **74**, 189901 (2006).
- [PWY06b] C.-H. PAO, S.-T. WU ET S.-K. YIP, *Superfluid stability in the BEC-BCS crossover*, Phys. Rev. B **73**, 132506 (2006).
- [PY06] C.-H. PAO ET S.-K. YIP, *Asymmetric Fermi superfluid in a harmonic trap*, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 5567 (2006).
- [RLS08] A. RECATI, C. LOBO ET S. STRINGARI, *Role of interactions in spin-polarized atomic Fermi gases at unitarity*, Phys. Rev. A **78**, 023633 (2008).
- [RS09] L. RADZIHOVSKY ET D. E. SHEEHY, *Imbalanced Feshbach-resonant Fermi gases* (2009), arXiv:0911.1740.
- [RTBJ03] C. A. REGAL, C. TICKNOR, J. L. BOHN ET D. S. JIN, *Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms*, Nature **424**, 47 (2003).
- [SdMRE93] C. A. R. SA DE MELO, M. RANDEIRA ET J. R. ENGELBRECHT, *Crossover from BCS to Bose superconductivity : Transition temperature and time-dependent Ginzburg-Landau theory*, Phys. Rev. Lett. **71**, 3202 (1993).
- [Shi08] Y. SHIN, *Determination of the equation of state of a polarized Fermi gas at unitarity*, Phys. Rev. A **77**, 041603 (2008).
- [SR07] D. E. SHEEHY ET L. RADZIHOVSKY, *BEC-BCS crossover, phase transitions and phase separation in polarized resonantly-paired superfluids*, Ann. Physics **322**, 1790 (2007).
- [SSSK08a] A. SCHIROTZEK, Y. SHIN, C. H. SCHUNCK ET W. KETTERLE, *Determination of the Superfluid Gap in Atomic Fermi Gases by Quasiparticle Spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **101**, 140403 (2008).
- [SSSK08b] Y. SHIN, A. SCHIROTZEK, C. H. SCHUNCK ET W. KETTERLE, *Realization of a Strongly Interacting Bose-Fermi Mixture from a Two-Component Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **101**, 070404 (2008).
- [SSSK08c] Y. SHIN, C. H. SCHUNCK, A. SCHIROTZEK ET W. KETTERLE, *Phase diagram of a two-component Fermi gas with resonant interactions*, Nature **451**, 689 (2008).
- [STM56] G. V. SKORNIKOV ET K. A. TER-MARTIROSIAN, *Three Body Problem for Short Range Forces. I. Scattering of Low Energy Neutrons by Deuterons*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **31**, 775 (1956), [Sov. Phys. JETP **4**, 648 (1957)].
- [SWSZ09] A. SCHIROTZEK, C.-H. WU, A. SOMMER ET M. W. ZWIERLEIN, *Observation of Fermi Polarons in a Tunable Fermi Liquid of Ultracold Atoms*, Phys. Rev. Lett. **102**, 230402 (2009).
- [SZS+06] Y. SHIN, M. W. ZWIERLEIN, C. H. SCHUNCK, A. SCHIROTZEK ET W. KETTERLE, *Observation of Phase Separation in a Strongly Interacting Imbalanced Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **97**, 030401 (2006).

- [Tan08] S. TAN, *Energetics of a strongly correlated Fermi gas*, Ann. Physics **323**, 2952 (2008).
- [Tok04] I. V. TOKATLY, *Dilute Fermi Gas in Quasi-One-Dimensional Traps : From Weakly Interacting Fermions via Hard Core Bosons to a Weakly Interacting Bose Gas*, Phys. Rev. Lett. **93**, 090405 (2004).
- [TSM⁺01] A. G. TRUSCOTT, K. E. STRECKER, W. I. MCALEXANDER, G. B. PARTRIDGE ET R. G. HULET, *Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms*, Science **291**, 2570 (2001).
- [TVA⁺08] M. TAGLIEBER, A.-C. VOIGT, T. AOKI, T. W. HÄNSCH ET K. DIECKMANN, *Quantum Degenerate Two-Species Fermi-Fermi Mixture Coexisting with a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **100**, 010401 (2008).
- [VTC⁺09] A.-C. VOIGT, M. TAGLIEBER, L. COSTA, T. AOKI, W. WIESER, T. W. HÄNSCH ET K. DIECKMANN, *Ultracold Heteronuclear Fermi-Fermi Molecules*, Phys. Rev. Lett. **102**, 020405 (2009).
- [WSK⁺08] E. WILLE, F. M. SPIEGELHALDER, G. KERNER, D. NAIK, A. TRENK-WALDER, G. HENDL, F. SCHRECK, R. GRIMM, T. G. TIECKE, J. T. M. WALRAVEN, S. J. J. M. F. KOKKELMANS, E. TIESINGA ET P. S. JULIENNE, *Exploring an Ultracold Fermi-Fermi Mixture : Interspecies Feshbach Resonances and Scattering Properties of Li6 and K40*, Phys. Rev. Lett. **100**, 053201 (2008).
- [Yan67] C. N. YANG, *Some Exact Results for the Many-Body Problem in one Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction*, Phys. Rev. Lett. **19**, 1312 (1967).
- [ZAS⁺05] M. W. ZWIERLEIN, J. R. ABO-SHAER, , A. SCHIROTZEK, C. H. SCHUNCK ET W. KETTERLE, *Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas*, Nature **435**, 1047 (2005).
- [ZSSK06a] M. W. ZWIERLEIN, A. SCHIROTZEK, C. H. SCHUNCK ET W. KETTERLE, *Fermionic Superfluidity with Imbalanced Spin Populations*, Science **311**, 492 (2006).
- [ZSSK06b] M. W. ZWIERLEIN, C. H. SCHUNCK, A. SCHIROTZEK ET W. KETTERLE, *Direct observation of the superfluid phase transition in ultracold Fermi gases*, Nature **442**, 54 (2006).

Publications

Publication 1 :

R. COMBESCOT ET S. GIRAUD, *Normal state of highly polarized fermi gases : Full many-body treatment*, Phys. Rev. Lett. **101**, 050404 (2008).

Publication 2 :

S. GIRAUD ET R. COMBESCOT, *Highly polarized Fermi gases : One-dimensional case*, Phys. Rev. A **79**, 043615 (2009).

Publication 3 :

R. COMBESCOT, S. GIRAUD ET X. LEYRONAS, *Analytical theory of the dressed bound state in highly polarized Fermi gases*, Europhys. Lett. **88**, 60007 (2009).

Normal State of Highly Polarized Fermi Gases: Full Many-Body Treatment

R. Combescot and S. Giraud

Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France
(Received 18 April 2008; revised manuscript received 3 July 2008; published 1 August 2008)

We consider a single \downarrow atom within a Fermi sea of \uparrow atoms. We elucidate by a full many-body analysis the quite mysterious agreement between Monte Carlo results and approximate calculations taking only into account single particle-hole excitations. It results from a nearly perfect destructive interference of the contributions of states with more than one particle-hole pair. This is linked to the remarkable efficiency of the expansion in powers of hole wave vectors, the lowest order leading to perfect interference. Going up to two particle-hole pairs gives an essentially perfect agreement with known exact results. Hence our treatment amounts to an exact solution of this problem.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.101.050404](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.050404)

PACS numbers: 05.30.Fk, 03.75.Ss, 71.10.Ca, 74.72.-h

The past few years have seen a very strong development of works, both experimental and theoretical, devoted to the exploration of the physical properties of ultracold fermionic gases [1]. In particular through the existence of Feshbach resonance these systems provide a physical realization of the Bose-Einstein condensation (BEC)-BCS crossover, and around the resonance very simple examples of strongly interacting fermionic systems, of high interest, for example, in condensed matter physics. More recently much effort has been focused on systems where there is a possibly strong imbalance between the two fermionic populations present in these gases [1,2], corresponding, for example, to the two lowest energy hyperfine states of ^6Li or ^{40}K .

A very interesting limiting case of such an imbalanced mixture is the case of a single fermion (say \downarrow spin) with mass m_\downarrow in the presence of a Fermi sea of another, say \uparrow , fermion species with mass m_\uparrow . This kind of mixture has anyway to be considered in the analysis [3,4] of experiments on trapped gases. Of major importance for the analysis of the phase diagram [3–5] are the binding energy E_b and the effective mass m^* of the \downarrow atom. At unitarity recent fixed-node Monte Carlo (MC) calculations [5] give $(5/3)E_b/E_F = 0.99(1)$ where E_F is the Fermi energy of the \uparrow atoms. On the other hand, a simple T -matrix analytical calculation, which happens to coincide with a variational calculation [4,6], gives $E_b = 0.6066E_F$, which is remarkably close to the MC result. This closeness has been confirmed very recently by diagrammatic MC calculations, leading to $E_b = 0.618E_F$ [7] or $E_b = 0.615E_F$ [8], depending on the specific detailed handling. The very close proximity of the analytical and the MC results, considered to be quite near the exact result, is a major puzzle. Indeed, at unitarity the system is strongly interacting, whereas the analytical treatment considers only single particle-hole excitations (of the noninteracting Hamiltonian H_c). This description is only appropriate for a weakly interacting system and should fail to a large extent at unitarity.

In this Letter we solve this puzzle and at the same time provide an essentially exact solution to the problem. This is done by considering states with any number of particle-

hole excitations. While the ground state of the interacting Hamiltonian H has important weights coming from many particle-hole excitations, we show that with respect to the calculation of the energy of the \downarrow atom these states give contributions which decrease extremely rapidly with the number of particle-hole excitations. This is basically due to destructive interferences between contributions of these many particle-hole excitations states when two particles (or holes) are exchanged. The efficiency of these interferences is directly linked to the key ingredient of our solution, namely, the fact that an expansion in powers of the hole wave vectors \mathbf{q}_i turns out, quite surprisingly and unexpectedly, to be an excellent approximation scheme. To lowest order in this approximation, i.e., when the dependence on the \mathbf{q}_i 's is neglected, the interference is perfect and there is a complete decoupling between the states with a different number of particle-hole excitations. In particular this justifies the consideration of single particle-hole excitations and explains why the above analytical result is so good. Improving the approximation by taking more properly into account the \mathbf{q}_i dependence provides a small coupling between the states with one and two particle-hole excitations, providing a small correction to the preceding result. In turn an even better handling of this dependence gives a coupling between states with two and three particle-hole excitations, giving a small change to the preceding small correction, and so on. In this way we obtain a series of results with strongly increasing accuracy, converging extremely rapidly to the exact result [9].

Since the theoretical solution of this problem has reached a high and secure level of agreement, which is quite infrequent in many-body problems including the case of cold fermionic gases, it provides a useful and convenient benchmark for experiments. Fortunately the agreement with experiments seems reasonably good [10]. Moreover, our solution is of high general interest since exact solutions of many-body problems are quite infrequent, mainly for three-dimensional cases. Our finding that a hole wave vector expansion works so well is also quite interesting, and it would be worthwhile to apply it to more complex many-body problems. Another useful conclusion regarding

self-consistent treatments can also be taken out of our solution. An attractive and standard way to try to improve on a simple T -matrix approximation, such as the one used in [6], is to use full propagators rather than bare ones in the T matrix. The practical handling is much more complicated, but this seems much more satisfactory since this amounts to including an infinite set of higher order diagrams. This has been done, for example, recently in the BEC-BCS crossover for equal spin populations [11]. We have made the corresponding self-consistent treatment for the T -matrix approximation of Ref. [6]. The result at unitarity is $E_b = 0.68E_F$, much worse than the nonself-consistent one. Our solution allows one to understand this failure. Indeed the exact solution displays almost complete cancellations between diagrams, whereas the self-consistent treatment destroys this delicate balance since it retains only some diagrams at a given order. Hence self-consistency does not systematically lead to an improvement.

Here we concentrate on the unitarity case. Indeed in the weak coupling limit $a \rightarrow 0_-$, an expansion in powers of a should be valid and the lowest order correction should give already quite good results. On the other side of unitarity, one can easily see from the details given below that our approximation should improve for increasing $1/a > 0$. Hence unitarity is a kind of worst case for our approach. Since it attracts in addition most of the interest in the strong coupling regime of large a , this justifies that we restrict our discussion to this case. Generalization away from unitarity is quite obvious.

Before presenting our solution, we display very explicitly the efficiency of the \mathbf{q}_i expansion on the simplest case of the lowest order solution [6]. At unitarity, for equal masses $m_\uparrow = m_\downarrow = m$, the binding energy $E_b = -E = |E|$ is given by

$$|E| = \sum_{q < k_F} \left[\sum_k \frac{m}{k^2} - \sum_{k > k_F} \frac{1}{E_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}} \right]^{-1}, \quad (1)$$

where $E_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)} = |E| + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}}$ with $\epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2m$. Setting $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ in $E_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$ leads to the equation $2/3\rho = 1 + \sqrt{\rho/2} \arctan \sqrt{\rho/2}$ for $\rho = |E|/E_F$. The solution $\rho = 0.5347$ is not so far from the actual result, which is already very satisfactory for such a crude approximation. However, we may improve on it considerably by treating \mathbf{q} to lowest significant order instead of neglecting it completely. This means we take for the \mathbf{k} angular average $\langle [|E| + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}}]^{-1} \rangle_{\mathbf{k}} \simeq [2\epsilon_{\mathbf{k}} + |E|]^{-1} + q^2 k^2 / (3m^2) [2\epsilon_{\mathbf{k}} + |E|]^{-3}$. This gives at unitarity $\rho = 0.5985$, which is remarkable compared to the exact [6] solution $\rho = 0.6066$ of Eq. (1) and the MC result $(5/3)\rho = 0.99(1)$ [5]. If we do not restrict ourselves to unitarity and let the scattering length vary, the corresponding solution for ρ turns out to be essentially undistinguishable on a graph from the exact numerical solution [6]. Although the situation is somewhat less favorable for unequal masses, this shows very simply

and explicitly the validity and efficiency of this \mathbf{q}_i expansion approach. We apply it now to the full many-body problem.

The Hamiltonian of our problem is

$$H = H_c + V \quad (2)$$

$$H_c = \sum_{\mathbf{P}} E(\mathbf{P}) b_{\mathbf{P}}^\dagger b_{\mathbf{P}} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (3)$$

$$V = g \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} b_{\mathbf{P}}^\dagger b_{\mathbf{P}'} \quad (4)$$

where $\epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2m_\uparrow$, $E(\mathbf{P}) = \mathbf{P}^2/2m_\downarrow$, and $c_{\mathbf{k}}$ and $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ are annihilation and creation operators for \uparrow -spin atoms while $b_{\mathbf{P}}$ and $b_{\mathbf{P}}^\dagger$ are for the \downarrow -spin atom. In the potential energy term V , the short-ranged interaction potential provides an upper cutoff k_c , which we will as usual let go to infinity while the coupling constant g goes to zero, keeping the scattering length finite in the relation $m_r/(2\pi a) = g^{-1} + \sum^{k_c} 2m_r/k^2$, where $m_r = m_\uparrow m_\downarrow / (m_\uparrow + m_\downarrow)$ is the reduced mass. Momentum conservation in the scattering is ensured by the Kronecker symbol $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{P}\mathbf{P}'}$. Physically this potential energy term creates (or annihilates) a single particle-hole pair from the Fermi sea, or merely scatters particles or holes, the momentum transfer being taken by the \downarrow -spin atom. Hence we are looking for the ground state as a general superposition of states with any number of particle-hole pairs:

$$|\psi\rangle = \alpha_0 |0\rangle + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}} |0\rangle + \dots \\ + \frac{1}{(n!)^2} \sum_{\{\mathbf{k}_i\}\{\mathbf{q}_j\}} \alpha_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j} b_{\mathbf{P}}^\dagger \prod_{i=1}^n c_{\mathbf{k}_i}^\dagger \prod_{j=1}^n c_{\mathbf{q}_j} |0\rangle + \dots, \quad (5)$$

where $|0\rangle = \prod_{k < k_F} c_{\mathbf{k}}^\dagger |\text{vac}\rangle$ is the Fermi sea of \uparrow spins. In the general term, we have $\mathbf{P} = \sum_j \mathbf{q}_j - \sum_i \mathbf{k}_i$ for the argument of the creation operator $b_{\mathbf{P}}^\dagger$ of the \downarrow spin, to ensure that the total momentum of the particles in any term is zero. We assume also implicitly $k_i > k_F$ and $q_j < k_F$. The coefficients $\alpha_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}$ (which is shorthand for $\alpha_{\{\mathbf{k}_i\}\{\mathbf{q}_j\}}$) are naturally antisymmetric with respect to the exchange of any of their arguments \mathbf{k}_i or \mathbf{q}_j .

Writing $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ (where we take as zero for the energy E the energy of the whole Fermi sea, and omit the average potential energy which disappears for $g \rightarrow 0$) and identifying the coefficients of specific particle-hole states in both terms, we find for the equations corresponding to the full Fermi sea and the Fermi sea with a single particle-hole pair:

$$-g^{-1}|E|\alpha_0 = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \quad (6)$$

$$-g^{-1}E_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = \alpha_0 + \sum_{\mathbf{K}} \alpha_{\mathbf{K}\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{Q}} - \sum_{\mathbf{K}\mathbf{Q}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{Q}}, \quad (7)$$

where we have introduced $E_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}^{(n)} = |E| + E(\sum_i^n \mathbf{k}_i - \sum_j^n \mathbf{q}_j) + \sum_i^n \epsilon_{\mathbf{k}_i} - \sum_j^n \epsilon_{\mathbf{q}_j}$. In the second equation the first term comes from the creation of a particle-hole pair in the Fermi sea, the second from the diffusion of the particle, the third from the diffusion of the hole, and the last one from the annihilation of a particle-hole pair. The next equation from two particle-hole pairs states is

$$-g^{-1}E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} = -\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} - \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} + \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} + \alpha_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{K}}\alpha_{\mathbf{K}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{K}}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'} - \sum_{\mathbf{Q}}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{Q}\mathbf{q}'} - \sum_{\mathbf{Q}}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{Q}} + \sum_{\mathbf{KQ}}\alpha_{\mathbf{K}\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{Q}\mathbf{q}\mathbf{q}'} \quad (8)$$

with physical origins for the various terms analogous to the preceding ones. One could write formally the generalization for any order, but we will not do it since this will not be necessary.

In Eq. (7) the second term turns out to give a divergent contribution when $k_c \rightarrow \infty$ and the limit is finite only after multiplication by g . By comparison the third term, where the summation is on the Fermi sea, displays no divergence and gives a zero contribution after multiplication by g . Hence we omit it from now on. Similarly in Eq. (8) we can omit the two analogous sums over \mathbf{Q} .

We see that, to solve our problem, the only thing we need to know from Eq. (8) is $\sum_{\mathbf{KQ}}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{Q}}$, which is the only quantity entering Eq. (7) from the subspace of two particle-hole pairs added to the Fermi sea. Now, if we neglect the wave vectors \mathbf{q} and \mathbf{q}' in $E^{(2)}$ and take $E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \simeq E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}\mathbf{0}}^{(2)}$, we can sum Eq. (8) over \mathbf{q}' . Because of the antisymmetry of $\alpha_{\mathbf{K}\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{Q}\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ in the exchange of \mathbf{Q} and \mathbf{q}' , the last term drops out. Hence, through this summation, Eq. (8) provides us with an integral equation for the function $\sum_{\mathbf{KQ}}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{Q}}$. We see that our approximation makes the subspaces with higher number of particle-hole pairs irrelevant for our problem, and we are completely decoupled from these higher subspaces. We have obtained, together with Eq. (6) and (7), a closed set of equations for α_0 , $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$, and $\sum_{\mathbf{KQ}}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{Q}}$, which can clearly be solved exactly by numerical means to provide the energy $|E|$. The precise justification for our approximation is that $k, k' > k_F$ and $q, q' < k_F$ make indeed in $E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}$ the k and k' terms dominant and q and q' ones negligible in a large part of the variables' space. Naturally this is an approximation; the interference is not exact but not so far from it. Hence the contribution from three particle-hole pairs states is not zero, but it is quite small, which is the essential point. In general terms the very rapid convergence with respect to the number of particle-hole excitations is due to the weak and slow dependence of $E_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}^{(n)}$ on the \mathbf{q}_j .

The same argument applied at the level of Eq. (7) allows us now to understand the success of the lowest order approach. If we make the approximation $E_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)} \simeq$

$|E| + E(\mathbf{k}) + \epsilon_{\mathbf{k}}$ and sum Eq. (7) over \mathbf{q} , we see that the last term is disappearing, due to the antisymmetry of $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{Q}}$ with respect to the exchange of \mathbf{q} and \mathbf{Q} , which leaves us with a decoupled set of equations for α_0 and $\sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}}\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$, leading to the good approximation discussed at the beginning. Conversely we may decide to make the approximation $E_{\mathbf{k}_i\mathbf{q}_j}^{(n)} \simeq E_{\mathbf{k}_i}^{(n)}$ at some higher order n . This provides by the same procedure a decoupling from higher order subspaces resulting in a closed set of n equations to be solved for $|E|$. Hence our analysis leads us to a cascade of successive approximations which converges very rapidly in a controlled way to the exact many-body solution, providing at the same time a full understanding of the success of the lowest order approximations and a practical way to obtain the exact results within the precision we like.

In practice the convergence is so fast, as shown by the quality of the lowest order results, that we will only need for any practical purpose to implement it to the next (i.e., second) order. However, in addition to our main scheme of approximations going from one order to the next, we may within a given order introduce an additional graduation of approximations. First, we can as described above make the approximation $E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \simeq E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}\mathbf{0}}^{(2)}$ and sum Eq. (8) over \mathbf{q}' . However, we can easily improve on this handling in the same spirit as for the lowest order approximation. Indeed the argument is still valid if we make only the approximation $E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} \simeq E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{0}}^{(2)}$, which takes better into account the \mathbf{q} dependence. Finally, since we know that the last term in Eq. (8) brings only a small correction, we may just decide to omit it, but treat the rest of the equation exactly without any approximation on $E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}$, which takes even better account of the \mathbf{q}_i dependence. This handling is at the same level as treating Eq. (1) exactly. In the same way it corresponds to a variational calculation since we have restricted the Hilbert space to contain at most two particle-hole pairs. This is the most precise level of approximation we will implement.

Introducing $G(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}') = g \sum_{\mathbf{K}} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{K}\mathbf{q}\mathbf{q}'}$, dividing Eq. (8) by $E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}$, summing over \mathbf{k}' , taking the $k_c \rightarrow \infty$, $g \rightarrow 0$ limit, which makes again some terms vanish, we find the integral equation:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}') \left[\frac{m_r}{2\pi a} + \sum_{\mathbf{k}'} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}} - \frac{2m_r}{k'^2} \right) \right] = \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} - \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{G(\mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{q}')}{E_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}}. \quad (9)$$

The term in the brackets in the left-hand side can be calculated analytically. In practice this integral equation is easily solved by iteration, the already fast convergence being increased by acceleration procedures. The same handling allows us

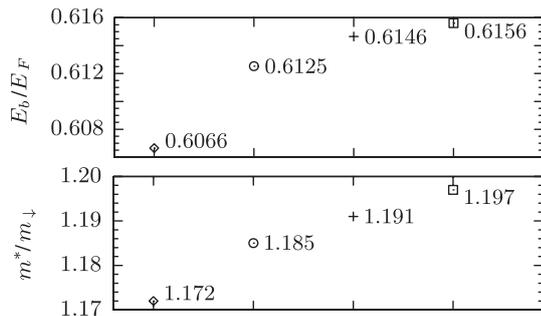


FIG. 1. Reduced \downarrow atom binding energy E_b and effective mass m^* , in the case of \uparrow and \downarrow atoms with equal masses, for the approximations of increasing accuracy discussed in the text. E_F is the Fermi energy of the \uparrow atoms. Diamond: First order approximation [6]. Circle: Second order with $\mathbf{q}\mathbf{q}' = \mathbf{0}\mathbf{0}$. Cross: Second order with $\mathbf{q}\mathbf{q}' = \mathbf{q}\mathbf{0}$. Square: Second order with no \mathbf{q} approximation (variational). For the effective mass we give coherently the last digits of our results to display clearly the trend, but they should not be taken for granted.

to solve the set of equations (7) and (9) with respect to $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$.

We have first checked the convergence of our theoretical scheme in the particular case $m_\downarrow \rightarrow \infty$ where the binding energy is known [6] to be exactly $\rho = 1/2$ at unitarity. This is naturally a very convenient case. However, one can easily see that the situation, with respect to the convergence of the \mathbf{q}_i expansion, is slightly less favorable than for the equal mass case. This is apparent in the first order result [6] $\rho = 0.465$ which, while being fairly good, is not so close to $1/2$. A convenient feature of this case is that there are no angular integrations to perform in solving the various equations. At second order we find 0.481 when we take $\mathbf{q}\mathbf{q}' = \mathbf{0}\mathbf{0}$. This improves into 0.487 for $\mathbf{q}\mathbf{q}' = \mathbf{q}\mathbf{0}$. However, with no approximation on $E^{(2)}$ (i.e., the variational result) we find $\rho = 0.498$, which shows quite explicitly that essentially, at second order, we have already fully converged toward the exact result. The relative sensitivity in this case to the approximations on \mathbf{q} may be physically understood as related to the lack of quantum smearing from the \downarrow atom since it acts as a fixed impurity. Another situation where the exact solution is known is the 1D case [6,12]. Here again we have checked [13] that the second order coincides almost with the exact results, including for the calculation of the effective mass [12].

We have then proceeded to the same calculations for the equal mass situation (see Fig. 1), which is markedly better in terms of convergence than the infinite mass case. For the $\mathbf{q}\mathbf{q}' = \mathbf{0}\mathbf{0}$ approximation we find 0.6125, the $\mathbf{q}\mathbf{q}' = \mathbf{q}\mathbf{0}$ result is 0.6146. Finally, the variational result is 0.6156. This displays quite clearly the very fast convergence of the \mathbf{q}_i expansion. It is very likely that this last result is essentially exact [14] (say, the exact one is bounded by 0.6158). This is supported by how close our above result for infinite m_\downarrow is from the exact one. More precisely, as seen explicitly from the $m_\downarrow = \infty$ case, each order brings a small correction to the preceding one. Since the second order result brings

typically a 10^{-2} correction to the first order one, we expect the third order correction to be at most of order 10^{-4} . Naturally the precision of our result is beyond practical use. We display it only to support our claim that we have a full solution for our problem.

Finally, we have calculated the effective mass, with the same approach applied to a small nonzero momentum for the whole system. This produces only some minor practical complications. We find $m^*/m_\downarrow = 1.20$. Our above precision on the binding energy gives us typically a ± 0.02 uncertainty. In agreement with our above findings, this result is fairly close to the first order value 1.17. We see that there is some significant discrepancies with some MC results [3,5] as well as conclusions from experiments [10]. Though they are not major ones, they may be relevant for the detailed understanding of experiments [15].

We are grateful to X. Leyronas for stimulating discussions. The ‘‘Laboratoire de Physique Statistique’’ is ‘‘Laboratoire associ  au Centre National de la Recherche Scientifique et aux Universit s Paris 6 et Paris 7.’’

-
- [1] For a very recent review, see S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, arXiv:0706.3360 [Rev. Mod. Phys. (to be published)].
 - [2] G. B. Partridge, W. Li, R. I. Kamar, Y. Liao, and R. G. Hulet, Science **311**, 503 (2006); Y. Shin, M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, A. Schirotzek, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **97**, 030401 (2006); C. H. Schunck, Y. Shin, A. Schirotzek, M. W. Zwierlein, and W. Ketterle, Science **316**, 867 (2007); Y. Shin, C. H. Schunck, A. Schirotzek, and W. Ketterle, Nature (London) **451**, 689 (2008).
 - [3] C. Lobo, A. Recati, S. Giorgini, and S. Stringari, Phys. Rev. Lett. **97**, 200403 (2006).
 - [4] F. Chevy, Phys. Rev. A **74**, 063628 (2006).
 - [5] S. Pilati and S. Giorgini, Phys. Rev. Lett. **100**, 030401 (2008).
 - [6] R. Combescot, A. Recati, C. Lobo, and F. Chevy, Phys. Rev. Lett. **98**, 180402 (2007).
 - [7] N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov, Phys. Rev. B **77**, 020408 (2008).
 - [8] N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov, Phys. Rev. B **77**, 125101 (2008).
 - [9] Note that the existence of strong cancellations between diagrammatic contributions has been pointed out in Refs. [7,8] in the course of MC calculations. Our solution provides an organization of the various terms, allowing us to understand and to make use of the nearly complete cancellations.
 - [10] Y. Shin, Phys. Rev. A **77**, 041603(R) (2008), and references therein.
 - [11] R. Haussmann, W. Rantner, S. Cerrito, and W. Zwerger, Phys. Rev. A **75**, 023610 (2007).
 - [12] J. B. McGuire, J. Math. Phys. (N.Y.) **7**, 123 (1966).
 - [13] S. Giraud and R. Combescot (to be published).
 - [14] It agrees very nicely with the MC results of [8].
 - [15] A. Recati, C. Lobo, and S. Stringari, arXiv:0803.4419 [Phys. Rev. A (to be published)].

Highly polarized Fermi gases: One-dimensional case

S. Giraud and R. Combescot

Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

(Received 10 February 2009; published 15 April 2009)

We consider the problem of a single particle interacting with N identical fermions, at zero temperature and in one dimension. We calculate the binding energy as well as the effective mass of the single particle. We use an approximate method developed in the three-dimensional case, where the Hilbert space for the excited states of the N fermions is restricted to have at most two particle-hole pairs. When the mass of the single particle is equal to the fermion mass, we find excellent agreement with the exact results of McGuire. When the mass of the single particle is infinite, we solve exactly the problem and find again excellent agreement between approximate results and exact ones. This overall agreement in one dimension gives a strong validation for the approximate method applied in three dimensions. Moreover it shows that our approximate treatment is excellent for the one-dimensional problem in the general case with respect to the mass of the single particle.

DOI: [10.1103/PhysRevA.79.043615](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.043615)

PACS number(s): 03.75.Ss, 05.30.Fk, 67.90.+z, 71.10.Ca

I. INTRODUCTION

The field of ultracold fermionic atoms has seen during the last 10 years an impressive amount of experimental and theoretical activities [1]. These systems provide experimental realization of various many-body systems that for a long time have been considered as purely theoretical models [2,3]. For instance, the one-dimensional (1D) Fermi gas can be experimentally realized by tightly confining the atomic cloud in the radial directions and weakly confining it along the axial direction. Its behavior can be characterized to a very good approximation by an effective 1D coupling constant g [4] for the description of its short-range interaction. One major experimental achievement of the last few years was the realization of the Bose-Einstein condensate (BEC)–BCS crossover by driving a mixture of two fermionic populations with an attractive interaction through a Feshbach resonance. On the BEC side of the crossover, a bound state appears between particles of different species, while on the BCS side, pairs exist only in the presence of the whole Fermi sea. In one dimension, the situation is quite different, because any attractive interaction produces a bound state. However, an analog of the three-dimensional (3D) crossover can be achieved in a quasi-1D trap where one can vary the effective coupling constant g from $-\infty$ to $+\infty$ by detuning the 3D scattering length [5].

Recently attention has been focused on imbalanced systems and in particular on the strongly imbalanced regime. The extreme situation corresponds to the case of a single \downarrow -spin particle interacting with a \uparrow -spin Fermi sea. The effective quasiparticle parameters, namely, the binding energy E_b of the \downarrow -spin atom and its effective mass m^* , are known to be of major interest for the analysis of the phase diagram [6,7]. In the three-dimensional case, analytical and Monte Carlo (MC) calculations have been done [6–11]. Quite surprisingly a simple variational calculation [8,9] gives results remarkably close to MC calculations. Very recently [12] we have explained this puzzling feature and shown that this simple calculation is just the first step in a series of approximations converging extremely rapidly toward the exact result. These approximations correspond to restricting the Hil-

bert space to states with increasing number of particle-hole excitations. The very fast convergence is due to almost perfect destructive interferences occurring when more than one particle-hole excitation is present. As a result [12] a variational calculation taking into account at most two particle-hole excitations provides already an essentially exact solution to the problem. In this paper, we use the same approximation to address the 1D problem, having mostly in mind the case of attractive interaction. However we consider also the case of repulsive interaction. In the case of equal masses, we can compare our results with the exact solution obtained by McGuire [2]. The excellent agreement we find provides a further check of the reliability of our approach.

II. GENERAL CALCULATION

We consider the problem of a single \downarrow -spin particle with mass m_\downarrow in the presence of a 1D Fermi sea, with Fermi momentum k_F and density $n_\uparrow = k_F/\pi$, of \uparrow spins with mass m_\uparrow . In the limit of short-range interactions, we can write the Hamiltonian of the system as

$$H = H_c + V, \quad (1)$$

$$H_c = \sum_Q E(Q) b_Q^\dagger b_Q + \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (2)$$

$$V = g \sum_{KK'QQ'} \delta_{KK'QQ'} c_K^\dagger c_{K'} b_Q^\dagger b_{Q'}, \quad (3)$$

where $\epsilon_k = k^2/2m_\uparrow$, $E(Q) = Q^2/2m_\downarrow$, and c_k and c_k^\dagger are annihilation and creation operators for \uparrow -spin atoms, while b_k and b_k^\dagger are for the \downarrow -spin atom. The Kronecker symbol $\delta_{KK'QQ'}$ ensures momentum conservation in the scattering. Contrary to the three-dimensional case [12], the representation of the interaction potential by a Dirac distribution is mathematically well defined, since there are no ultraviolet divergences. In the three-dimensional case one deals usually with the ultraviolet divergences by introducing a cutoff k_c . For a fixed value of the scattering length a , the coupling constant depends on k_c . Then one lets k_c go to infinity, which implies

that the coupling constant must go to zero for fixed a . In the one-dimensional case nothing corresponds to this procedure. The coupling constant g is either negative or positive, and there is no need to let it go to zero. It is related to the value of the one-dimensional scattering length by $g = -1/m_r a$, where $m_r = m_\downarrow m_\uparrow / (m_\downarrow + m_\uparrow)$ is the reduced mass (we have set $\hbar = 1$).

Following the same idea as in Ref. [12], we write, for a system of total momentum p , the many-body wave function as

$$|\psi\rangle = \alpha_0 b_p^\dagger |0\rangle + \sum_{kq} \alpha_{kq} b_{p+q-k}^\dagger c_k^\dagger c_q |0\rangle + \frac{1}{4} \sum_{kk'qq'} \alpha_{kk'qq'} b_{p+q+q'-k-k'}^\dagger c_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_q c_{q'} |0\rangle, \quad (4)$$

where $|0\rangle = \prod_{|q| < k_F} c_q^\dagger |\text{vac}\rangle$ is the noninteracting Fermi sea of \uparrow spins and the sums on q and k are implicitly limited to $|q| < k_F$ and $|k| > k_F$. This state is a superposition of states with up to two particle-hole pairs. In the first term, the \uparrow -spin free Fermi sea is in its ground state and the \downarrow -spin atom carries the momentum p , while the two other terms correspond to excited states with creation of one or two particle-hole pairs in the Fermi sea, the \downarrow -spin atom carrying the rest of the momentum. In the third term, the coefficients $\alpha_{kk'qq'}$ are antisymmetric with respect to the exchange of their arguments ($\alpha_{kk'qq'} = -\alpha_{k'kqq'} = -\alpha_{kk'q'q} = \alpha_{k'kq'q}$) and the factor of $1/4$ corrects multiple counting.

Now, we write the Schrödinger equation $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ and project it on the subspace corresponding to Eq. (4). This yields a set of three coupled equations. The two first equations are obtained by projecting onto the full Fermi sea and the Fermi sea with a single particle-hole pair,

$$-g^{-1} E_p^{(0)} \alpha_0 = \sum_{kq} \alpha_{kq}, \quad (5)$$

$$-g^{-1} E_{p,kq}^{(1)} \alpha_{kq} = \alpha_0 + \sum_K \alpha_{Kq} - \sum_Q \alpha_{kQ} - \sum_{KQ} \alpha_{kKqQ}, \quad (6)$$

where we have introduced $E_p^{(0)} = -E + gn_\uparrow + E(p)$, and $E_{p,kq}^{(1)} = -E + gn_\uparrow + E(p+q-k) + \epsilon_k - \epsilon_q$. Here E denotes the energy measured from the energy of the free Fermi sea. Note that if we omit the last term of Eq. (6), these two first equations would be decoupled from the third one and this would correspond to the variational calculation [9] with a single particle-hole pair. The next equation is

$$-g^{-1} E_{p,kk'qq'}^{(2)} \alpha_{kk'qq'} = -\alpha_{kq} - \alpha_{k'q'} + \alpha_{kq'} + \alpha_{k'q} + \sum_K \alpha_{Kk'qq'} + \sum_K \alpha_{kKqq'} - \sum_Q \alpha_{kk'Qq'} - \sum_Q \alpha_{kk'qQ}, \quad (7)$$

where $E_{p,kk'qq'}^{(2)} = -E + gn_\uparrow + E(p+q+q'-k-k') + \epsilon_k + \epsilon_{k'} - \epsilon_q - \epsilon_{q'}$. Here, since we have restricted the Hilbert space to contain at most two particle-hole pairs, we have omitted the overlap with states containing three particle-hole pairs. We note that such a restriction in the Hilbert space corresponds

to performing a variational calculation, since instead of leaving a complete freedom for the expression of the eigenstate, we apply on it a specific constraint. For $p=0$, we have $E = -E_b$, while the variation in E for small p gives the effective mass. We consider first the calculation of the binding energy.

It is first worth noticing that for attractive interaction, the two limiting cases, namely, $g \rightarrow 0_-$ and $g \rightarrow -\infty$, are already well described by the first-order approximation, corresponding to retaining only Eqs. (5) and (6), with the last term in the right-hand side of Eq. (6) omitted. In the weak-coupling limit $g \rightarrow 0_-$, Eq. (5) gives to lowest order the expected result, that is, the mean-field interaction energy $E = gn_\uparrow$. Then Eq. (6) provides the correction expected from second-order perturbation theory, namely, $E = gn_\uparrow - m_r g^2 \{1/8 + [\text{Li}_2(\alpha) - \text{Li}_2(-\alpha)]/2\pi^2\}$, where $\alpha = (m_\downarrow - m_\uparrow)/(m_\downarrow + m_\uparrow)$ and $\text{Li}_2(z) = \sum_{n \geq 1} z^n/n^2$ is the dilogarithm function. In the case of equal masses, the result is identical to the one obtained by McGuire [2] in the same approximation.

In the strong-coupling regime, we can check that the binding energy of the molecular state, $-E = E_b = m_r g^2/2$, is indeed solution to dominant order. In this regime, since q is limited to $|q| < k_F$, the dependence on q is negligible in $E_{0,kq}^{(1)}$. Now we can sum Eq. (6) over q . This gives $-g^{-1}[E_b + k^2/2m_r] \sum_q \alpha_{kq} = \alpha_0 k_F/\pi + \sum_{Kq} \alpha_{Kq}$. Then we can divide this equation by $[E_b + k^2/2m_r]$ and sum over k . To dominant order we find $\sum_k [E_b + k^2/2m_r]^{-1} = \sqrt{m_r/2E_b}$, leading to $[1 + g^{-1} \sqrt{2E_b/m_r}] \sum_{kq} \alpha_{kq} = -\alpha_0 k_F/\pi$. Inserting this relation into Eq. (5) gives $1 + g^{-1} \sqrt{2E_b/m_r} = g k_F/\pi E_b$ to dominant order. This is indeed consistent with $E_b \approx m_r g^2/2$.

In the general case, these equations can be numerically solved by successive iterations to provide the binding energy E_b and the effective mass m^* . This is done in the same way as for the three-dimensional treatment, but obviously the numerical work is much lighter since one needs to perform only one-dimensional integrals. On the other hand, in contrast with the 3D situation, the third term in the right-hand side of Eq. (6) and the last two terms in the right-hand side of Eq. (7) do not disappear. However since we use an iterative method this does not make a major problem.

III. EQUAL MASSES

We first investigate the situation of equal masses $m_\downarrow = m_\uparrow = m$. In this case, the exact solution of this problem was obtained by McGuire [2] using the Bethe ansatz (with a small sign mistake in the last two equations on p. 126 of [2] and in the expression for m^*). With our notations (we have the opposite sign convention for the interaction) the correct expressions are

$$\frac{E_b}{E_F} = -\frac{2}{\pi} \left[y - \frac{\pi}{2} y^2 + (1 + y^2) \arctan y \right], \quad (8)$$

$$\frac{m^*}{m} = \frac{\left(1 - \frac{2}{\pi} \arctan y\right)^2}{1 - \frac{2}{\pi} \left[\arctan y + \frac{y}{1 + y^2}\right]}, \quad (9)$$

where $y = mg/2k_F$ and $E_F = k_F^2/2m$ is the Fermi energy of the \uparrow atoms. They allow us to check the quality of the conver-

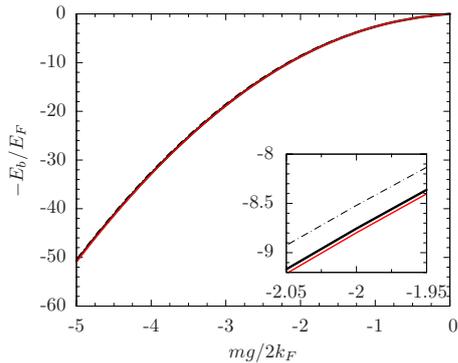


FIG. 1. (Color online) Reduced \downarrow -atom binding energy E_b as a function of $mg/2k_F$ for equal masses $m_\uparrow=m_\downarrow=m$ and attractive interactions $g<0$. From top to bottom: numerical results for the first- (dashed-dotted line) and second-order (solid thick line) approximations and exact solution (8) (solid red line). The inset shows a zoom of the region around $mg/2k_F=-2$ (we have chosen a value larger than the one discussed in the text to make it easier to see the difference in the figure).

gence of our successive approximations to the exact many-body solution.

We begin by considering the case of attractive interactions $g<0$, which is the more interesting one in relation to the 3D case [12]. The overall result of the comparison is displayed in Fig. 1. As indicated in Ref. [9] and clearly seen in Fig. 1, the lowest-order approximation for the binding energy is already in good agreement with the exact solution and the two curves are barely distinguishable in the graph. However, the second-order approximation improves it significantly, leading to results completely undistinguishable from the exact result on the graph. To be more specific, let us consider the case for $mg/k_F=-1$. The exact result is $E_b=0.9373E_F$. We may consider the Hartree approximation $E_b=-gn_\uparrow=-(2/\pi)(mg/k_F)E_F$ as a zeroth-order approximation. In the present case it gives $E_b=0.6366E_F$, which means a 3.2×10^{-1} relative error compared to the exact result. The first-order approximation gives $E_b=0.9242E_F$, that is, a 1.4×10^{-2} relative error. Finally we find for our second-order approximation $E_b=0.9361E_F$, which corresponds to only a 1.3×10^{-3} relative error. We see that the convergence is very

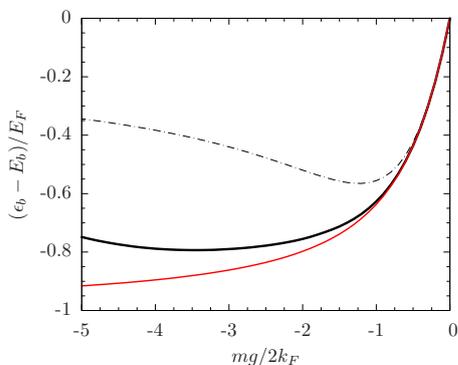


FIG. 2. (Color online) Reduced \downarrow -atom binding energy E_b as a function of $mg/2k_F$ for equal masses $m_\uparrow=m_\downarrow=m$. Same conventions as in Fig. 1 are used.

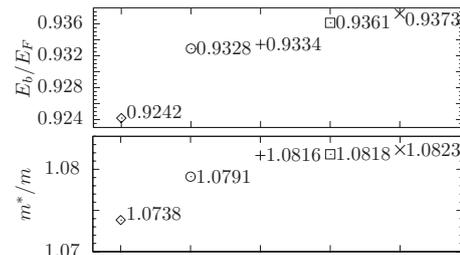


FIG. 3. Reduced \downarrow -atom binding energy E_b and effective mass m^* , for equal masses $m_\uparrow=m_\downarrow=m$ and $mg/k_F=-1$. Successive approximations to the exact many-body problem discussed in the text are applied. Diamond: first-order approximation. Circle: second order with $qq'=00$. Plus: second order with $qq'=q0$. Square: second order with no q approximation. Cross: exact solution.

fast, which gives very strong support to the idea that the result obtained in the three-dimensional case is nearly the exact solution. Actually this is even more so because the convergence in one dimension is expected to be slower than in three dimensions. Indeed the rapidity of this convergence is related [12] to the effective phase space corresponding to particle wave vectors $k>k_F$, compared to the phase space corresponding to the hole wave vectors $q<k_F$. The ratio between the volumes of these phase spaces is clearly an increasing function of space dimensionality.

Naturally, for large values of the coupling constant, all the results look very close in Fig. 1 because they are near the large asymptotic value $-\epsilon_b/E_F=-2(mg/2k_F)^2$. In order to make the differences easier to see, we have plotted in Fig. 2 the difference between the results and this asymptotic expression.

We may also apply the same cascade of successive approximations as in Ref. [12]. This leads to the approximations $E_{p,kq}^{(1)} \simeq E_{p,k0}^{(1)}$ in the first-order equations and $E_{p,kk'qq'}^{(2)} \simeq E_{p,kk'00}^{(2)}$ or $E_{p,kk'qq'}^{(2)} \simeq E_{p,kk'q0}^{(2)}$ in the second-order equations. The results are displayed in Fig. 3 for $mg/k_F=-1$.

Finally, the relative effective mass m^*/m is plotted in Fig. 4. Naturally, in the weak-coupling limit, m^* approaches m since the quasiparticle has the effective mass of the free \downarrow -spin atom. In the strong-coupling regime, m^* approaches the mass $2m$ of the two bound particles forming a dimer, as expected physically. The main quantitative feature of our re-

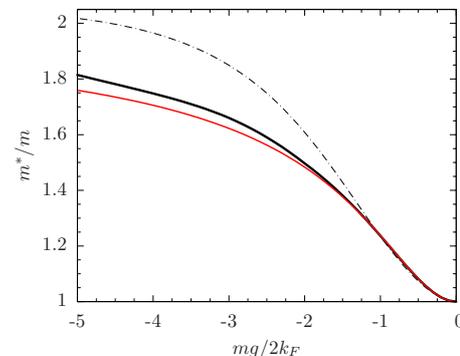


FIG. 4. (Color online) Relative effective mass m^*/m as a function of $mg/2k_F$ for equal masses $m_\uparrow=m_\downarrow=m$. Same conventions as in Fig. 1 are used.

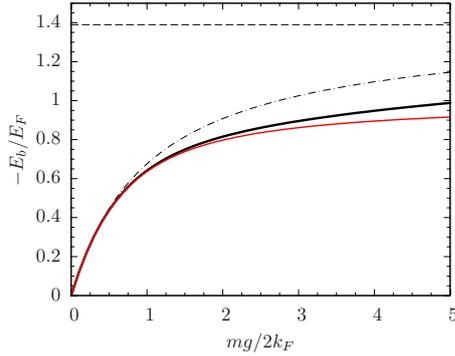


FIG. 5. (Color online) Reduced \downarrow -atom binding energy E_b as a function of $mg/2k_F$ for equal masses $m_\uparrow=m_\downarrow=m$ and repulsive interactions $g>0$. Same conventions as in Fig. 1 are used. In the strong-repulsive limit $g\rightarrow\infty$, first- and second-order approximations give $E=-E_b=1.389E_F$ (indicated by the dashed line), while the exact result is $E=-E_b=E_F$.

sults is that, contrary to the binding energy, the effective mass is more sensitive to our approximations as one could expect, especially in the strong-coupling regime. The first-order approximation is substantially improved by our inclusion of two particle-hole excitations. As above, this second-order approximation is fairly close to the exact solution. We note that although our variational calculation gives naturally an upper bound for the energy E , the obtained effective mass is not a lower bound of the exact one since it is given by the variation in E .

It is also of interest to investigate the case of repulsive interactions $g>0$, since it is no more difficult to calculate than the attractive one. The result for the energy is displayed in Fig. 5. One sees that for small couplings the first- and second-order approximations are still excellent, which can merely be understood by continuity from the attractive case with small coupling, or the fact that in this domain standard perturbation theory is expected to be good. However for larger coupling the first-order approximation becomes markedly less satisfactory. The second-order approximation remains quite good, but also with a trend toward a deterioration of the agreement. This feature is actually easy to understand. For strongly attractive interaction, the large negative energy E makes $E_{p,kq}^{(1)}$ and $E_{p,kk'qq'}^{(2)}$ large and positive. As a result they depend weakly on the q (hole) variables, which is the basic reason [12] for the success of the approximations. On the other hand for repulsive interactions, E becomes positive and $E_{p,kq}^{(1)}$ and $E_{p,kk'qq'}^{(2)}$ are smaller, and accordingly their relative change under variation in the q variables becomes more important. As expected under these circumstances, the agreement for the effective mass, shown in Fig. 6, is very rapidly unsatisfactory for the first-order approximation. The second-order approximation stays quite good until $mg/2k_F\sim 1.5$, but the disagreement increases quite markedly when the coupling is increased much further. These results are interesting since they come as a confirmation of the basic reason [12] for the quality of our approximation in the attractive domain.

In the strong-repulsive limit $g\rightarrow\infty$, the binding energies given by the first- and second-order approximations are seen

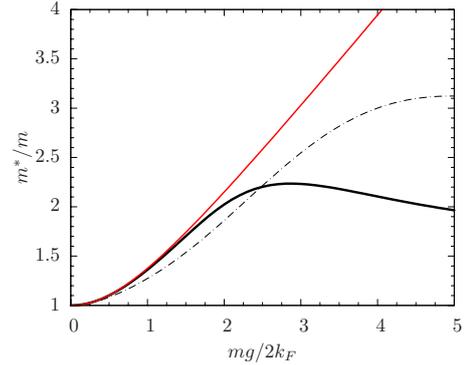


FIG. 6. (Color online) Relative effective mass m^*/m as a function of $mg/2k_F$ for equal masses $m_\uparrow=m_\downarrow=m$ and repulsive interactions $g>0$. Same conventions as in Fig. 1.

to converge to the same value. This limiting value can be determined analytically by performing a $1/g$ expansion in the following way. (We make the calculation directly for a general value of the mass ratio $r=m_\downarrow/m_\uparrow$ since this does not make any problem.) We consider the equations of the first-order approximation, that is, Eqs. (5) and (6) with the last term in the right-hand side omitted. We set for simplicity $\alpha_0=1$ and expand α_{kq} in powers of $1/y$ where $y=m_r g/k_F$:

$$\alpha_{kq} = \alpha_{kq}^{(0)} + \alpha_{kq}^{(1)}/y + \dots \quad (10)$$

To lowest order, Eqs. (5) and (6) give

$$-n_\uparrow = \sum_{kq} \alpha_{kq}^{(0)}, \quad (11)$$

$$-n_\uparrow \alpha_{kq}^{(0)} = 1 + \sum_K \alpha_{Kq}^{(0)} - \sum_Q \alpha_{kQ}^{(0)}. \quad (12)$$

Since in Eq. (12) the sum on K in the right-hand side converges, this implies that we have $\alpha_{kq}^{(0)} \rightarrow 0$ for $k \rightarrow \infty$. Taking the limit $k \rightarrow \infty$ in this equation, we obtain $\sum_K \alpha_{Kq}^{(0)} = -1$ and accordingly, from Eq. (12), $\alpha_{kq}^{(0)} \equiv \alpha_k^{(0)}$ does not depend on q . Note that, after summation over q , this finding is completely consistent with Eq. (11). Now to first order in $1/y$, we find

$$E_b = -\frac{k_F}{m_r} \sum_{kq} \alpha_{kq}^{(1)}, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} & [E_b + E(q-k) + \epsilon_k - \epsilon_q] \alpha_k^{(0)} \\ &= \frac{k_F}{m_r} \left(-\sum_K \alpha_{Kq}^{(1)} + \sum_Q \alpha_{kQ}^{(1)} - n_\uparrow \alpha_{kq}^{(1)} \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Now we can sum this last equation [Eq. (14)] over q , which gives $n_\uparrow [E_b + k^2/2m_r + (1/r-1)E_F/3] \alpha_k^{(0)} = E_b$, taking into account Eq. (13). Using the relation $\sum_k \alpha_k^{(0)} = -1$, we get a closed equation for E_b which can be easily solved numerically. For equal masses $r=1$, it gives $E=-E_b=1.389E_F$, while from Eq. (8) the exact result is $E=-E_b=E_F$. One can see that working to the second-order approximation does not bring any change to this result, as supported by numerical results. However we will not give details on this since this matter is not easy and not a major interest.

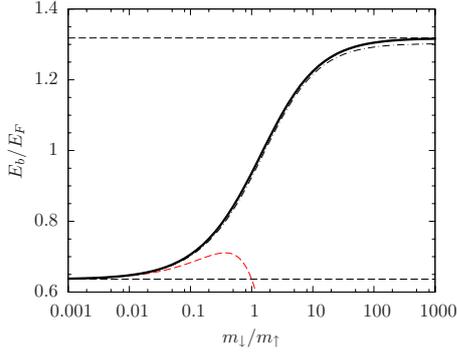


FIG. 7. (Color online) Reduced \downarrow -atom binding energy E_b as a function of $r=m_\downarrow/m_\uparrow$ for $m_\uparrow g/k_F=-1$. Dashed-dotted line: first-order approximation. Solid thick line: second-order approximation. For $r\rightarrow\infty$, E_b goes to $(1+1/\pi)E_F\approx 1.318E_F$ [Eq. (19)], while for small r , $E_b/E_F\approx 2/\pi-2r\ln r/\pi^2$ (dashed red line).

IV. UNEQUAL MASSES

In the following, we come back to the general case of unequal masses. We restrict ourselves to the attractive case and consider as an example the single value $m_\uparrow g/k_F=-1$ for the coupling constant. The results of our calculations as a function of the mass ratio $r=m_\downarrow/m_\uparrow$ are presented in Figs. 7 and 8, respectively, for the binding energy and the effective mass. For this value of the coupling constant the binding energy does not display very large variations. The limiting cases can be understood fairly easily.

For $r\rightarrow 0$, at fixed coupling constant g , the binding energy E_b goes to $-gn_\uparrow$. Indeed in this case, the kinetic energy of the \downarrow -spin particle goes to infinity as soon as its momentum is not zero. This implies that $E_{p,kq}^{(1)}$ and $E_{p,kk'qq'}^{(2)}$ go to infinity, so that α_{kq} and $\alpha_{kk'qq'}$ go to zero in Eqs. (6) and (7). Clearly this argument could be extended to any order in our successive approximation scheme. Hence this result is exact. This is quite reasonable physically since this limiting situation can also be seen as the case of a single particle of mass m_\downarrow moving in the presence of n_\uparrow particles of infinite mass, which means that there is no dynamics associated with them. Hence it is quite natural to find only the mean-field term $-gn_\uparrow$ in the binding energy.

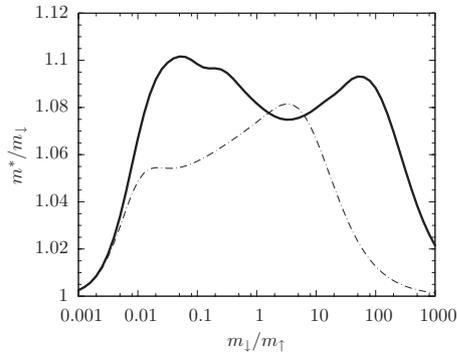


FIG. 8. Relative effective mass m^*/m_\downarrow as a function of $r=m_\downarrow/m_\uparrow$ for $m_\uparrow g/k_F=-1$. Dashed-dotted line: first-order approximation. Solid thick line: second-order approximation. For $r\rightarrow 0$ and $r\rightarrow\infty$, m^* goes to m_\downarrow .

The first correction is obtained from Eq. (6). To dominant order, we find $\alpha_{kq}=-g\alpha_0/[E(q-k)+\epsilon_k-\epsilon_q]$. Inserting this relation in Eq. (5) gives $E_b=-gn_\uparrow-g^2m_\uparrow r\ln r/\pi^2$.

As seen from Fig. 8, the variations in the effective mass are very small, which is the essential result. It is not clear how the detailed structure would survive in improved approximations. The limiting cases are again easy to obtain. For the same reason as above, the effective mass in the limit $r\rightarrow 0$ is merely equal to the bare mass $m^*=m_\downarrow$. The same is obviously true in the opposite case where $r\rightarrow\infty$, which we consider now with respect to the binding energy as a function of the coupling constant.

V. INFINITE MASS

We consider now in more details the other limit where the mass of the \downarrow particle goes to infinity, $m_\downarrow\rightarrow\infty$. In this case, there is no dynamics associated with this particle and the problem reduces to the one-body problem of an impurity interacting with a free Fermi sea through a contact potential. It can be solved exactly in a way analogous to the 3D case. The impurity is at the origin and the system is enclosed in the segment $[-R,R]$, with $R\rightarrow\infty$ in the thermodynamic limit. Without loss of generality we assume for simplicity that the number of \uparrow -spin atoms, N , is even. The only scattered states correspond to even wave functions $\varphi_k^+(x)$, while odd wave functions $\varphi_k^-(x)$ do not feel the contact potential and behave just as free particles,

$$\varphi_k^+(x)=A_k\cos[k|x|+\delta(k)], \quad (15)$$

$$\varphi_k^-(x)=\sqrt{1/R}\sin(kx), \quad (16)$$

where the phase shift is given by $\cot\delta(k)=ka$ and $A_k^2=1/R^2$ to order $1/R^2$, which is sufficient for our purposes.

Since the wave function has to be zero for $x=R$, the allowed wave vectors k_p^+ and k_p^- are given by $k_p^+R+\delta(k_p^+)=(p-1/2)\pi$ and $k_p^-R=p\pi$. For positive coupling constant g , the N \uparrow -spin atoms occupy N scattering states ($N/2$ odd states and $N/2$ even states) corresponding to $p=1,\dots,N/2$. Thus, the Fermi momentum is given by $k_FR=(N/2)\pi$ and the energy of all the atoms is $E=\sum_{p=1}^{N/2}(k_p^+)^2/2m_\uparrow+\sum_{p=1}^{N/2}(k_p^-)^2/2m_\uparrow$. For negative coupling constant g , our δ potential also supports a bound state with binding energy $\epsilon_b=1/2m_\uparrow a^2=m_\uparrow g^2/2$ and its wave function is $\psi(x)=e^{-|x|/a}/\sqrt{a}$. Starting from the noninteracting situation, we conclude that the N \uparrow -spin atoms occupy $N/2-1$ even scattering states corresponding to $p=2,\dots,N/2$, the single bound state, and $N/2$ odd states. Therefore, the energy of all the atoms is $E=-1/2m_\uparrow a^2+\sum_{p=2}^{N/2}(k_p^+)^2/2m_\uparrow+\sum_{p=1}^{N/2}(k_p^-)^2/2m_\uparrow$.

We then identify the difference between the noninteracting Fermi sea energy and this energy with the \downarrow -atom binding energy. Since the odd states are not scattered, we find to order $1/N$

$$\frac{E_b}{E_F}=y^2\theta(-y)+\frac{8}{\pi N^2}\sum_{p=1}^{N/2}p\delta(k_p^+), \quad (17)$$

where $y=m_\uparrow g/k_F$ and θ is the usual Heaviside function. To order $1/N$, the phase shift is written as $\delta(k_p^+)=$

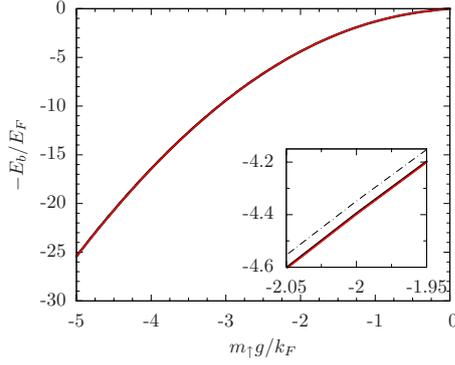


FIG. 9. (Color online) Reduced \downarrow -atom binding energy E_b as a function of $m_1 g/k_F$ for $m_\downarrow = \infty$ and attractive interactions $g < 0$. From top to bottom: numerical results for the first- (dashed-dotted line) and second-order (solid thick line) approximations and exact solution [Eq. (19)] (solid red line). The inset shows a zoom of the region around $m_1 g/k_F = -2$. Actually at the scale of the figure, the second-order approximation and the exact solution almost fall on top of each other, even in the inset.

$-\cot^{-1}[2p/yN]$. We convert now this sum to an integral and find

$$\frac{E_b}{E_F} = y^2 \theta(-y) - \frac{2}{\pi} \int_0^1 u \cot^{-1}\left(\frac{u}{y}\right) du. \quad (18)$$

Finally, we obtain

$$\frac{E_b}{E_F} = -\frac{1}{\pi} \left[y - \frac{\pi}{2} y^2 + (1+y^2) \arctan y \right]. \quad (19)$$

This result is valid both for positive and negative g , which is not obvious since there is a bound state in the latter situation but not in the former one. This situation is the same as the one found for equal masses [2]. Note also that this result is just one-half of the exact result for equal masses [Eq. (8)], provided we take in the definition of y the reduced mass, i.e., $y = m_r g/k_F$.

Here again, we can check the convergence of our theoretical scheme [12]. This is done in Fig. 9, which is very similar to Fig. 1. Similarly the inset shows a zoom around $m_1 g/k_F = -2$, where it is clearly seen again that, although the first-order result is already quite good, it is markedly improved by the second-order one. Specifically for $m_1 g/k_F = -1$, the first- and second-order approximations give, respectively, $E_b = 1.302E_F$ and $E_b = 1.317E_F$, while the exact solution is

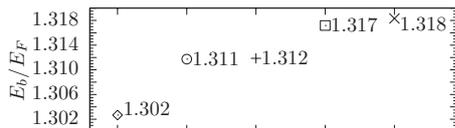


FIG. 10. Reduced \downarrow -atom binding energy E_b for $m_\downarrow = \infty$ and $m_1 g/k_F = -1$. Successive approximations to the exact many-body problem discussed in the text are applied. Diamond: first-order approximation. Circle: second order with $qq' = 0$. Plus: second order with $qq' = q_0$. Square: second order with no q approximation. Cross: exact solution.

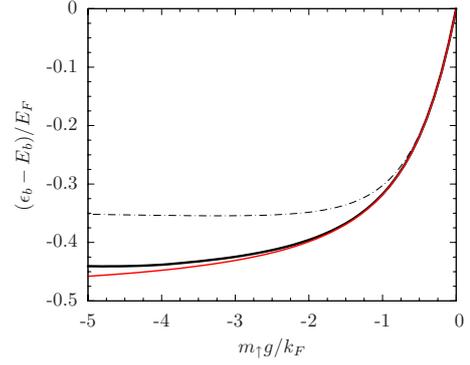


FIG. 11. (Color online) Reduced \downarrow -atom binding energy E_b as a function of $m_1 g/k_F$ for $m_\downarrow = \infty$. Same conventions as in Fig. 9.

$E_b/E_F = 1 + 1/\pi \approx 1.318$. We also show in Fig. 10, together with these values, the results for the intermediate approximations, mentioned above for equal masses.

Considering the large-coupling-constant limit, we remove again from the binding energy the trivial contribution ϵ_b of the bound state and display the result in Fig. 11. As it can be seen from Eq. (19), the exact result is $E_b - \epsilon_b = 0.5E_F$ in this limit, with a corrective term of $-(2/3\pi)E_F/|y|$. Although the relative error is quite small in this regime, as it can be seen from Fig. 11, the absolute error becomes larger, on the order of 0.1, for the first- as well as for second-order approximation. This is clearly due to the near singularity present in the equations, linked to the existence of the bound state.

The corresponding results are given in Fig. 12 for positive coupling constant. Just as for the case of equal masses, the approximations get worse when the coupling constant increases, but the deterioration is markedly less pronounced. For $g \rightarrow \infty$ the exact result is easily found to be $E = -E_b = 0.5E_F$. The variation in the binding energy when g goes from $+\infty$ to $-\infty$ is therefore $\epsilon_b + E_F$. This is easy to understand. The occupied plane waves have exactly the same wave vectors in the two limits [the phase shift is $\pi/2 \pmod{\pi}$ in both cases]. The only difference is that, for $g \rightarrow -\infty$ we have the bound state with binding energy ϵ_b , and in addition a \uparrow particle has been transferred to this bound state from the

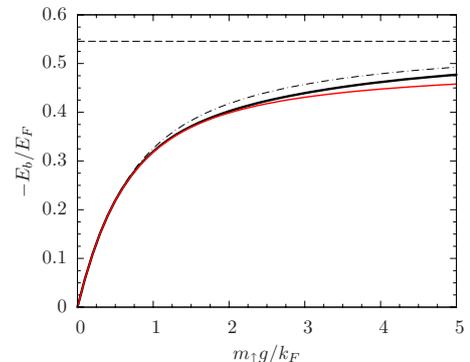


FIG. 12. (Color online) Reduced \downarrow -atom binding energy E_b as a function of $m_1 g/k_F$ for $m_\downarrow = \infty$ and repulsive interactions $g > 0$. In the strong-repulsive limit $g \rightarrow \infty$, first- and second-order approximations give $E = -E_b = 0.5457E_F$, while the exact result is $E = -E_b = 0.5E_F$. Same conventions as in Fig. 9 are used.

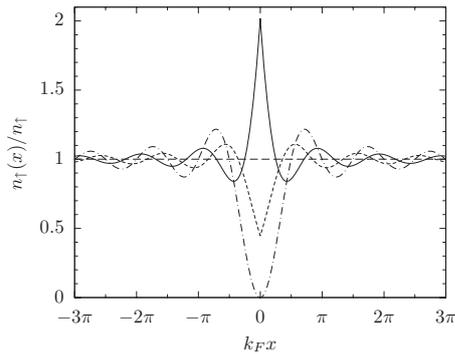


FIG. 13. Reduced \uparrow -spin local density as a function of $k_F x$ for various coupling constants $y = m_\uparrow g / k_F$. Solid line: $y = -0.5$; thin dashed line: $y = 0$; dashed line: $y = 0.5$; dashed-dotted line: $y = \pm\infty$ (in the case $y = -\infty$ there is in addition a δ -function spike at $x = 0$).

Fermi level, which explains the additional contribution E_F . It is worth noticing that this variation is half the one found [2] in the case of equal masses.

Finally it is easy and of interest to calculate the \uparrow -spin local density from the above considerations. It is given by the sum of absolute squares of the N wave functions. Converting this sum to an integral yields

$$\frac{n_\uparrow(x)}{n_\uparrow} = 1 - \pi y e^{2k_F |x| y} \theta(-y) + \int_0^1 \{ \cos^2[uk_F |x| - \cot^{-1}(u/y)] - \cos^2(uk_F x) \} du. \quad (20)$$

For $y = 0$ one has naturally $n_\uparrow(x) = n_\uparrow$, while for $y \rightarrow \pm\infty$ this result gives $n_\uparrow(x) = n_\uparrow [1 - \sin(2k_F x) / 2k_F x]$, which vanishes when $x = 0$. Note that this exact result [Eq. (20)] for infinite m_\downarrow is significantly different from the exact result found for equal masses [2]. In this latter case, the \uparrow -spin atoms density is always lower than n_\uparrow for positive g and greater than n_\uparrow for negative g [13]. The resulting $n_\uparrow(x)/n_\uparrow$ is displayed in Fig. 13 for several values of y .

VI. CONCLUSION

We have considered in this paper the problem of a single particle (“impurity”) in the presence of N identical fermions, at zero temperature and in the one-dimensional case. The only interaction term is between the impurity and the N fermions, which have no interaction between themselves as suited for the effective interaction of a single species of ultracold fermions. This situation can easily be realized experimentally in ultracold Fermi gases. This problem can be considered as an extreme case of polarized Fermi gases and its solution is relevant for the case of strong polarization. We have used an approximate method developed in the three-dimensional case, where the Hilbert space for the excited states of the N fermions is restricted to have at most two particle-hole pairs. We have compared our approximate results with exact ones, which are known for special values of the mass ratio. When the mass of the impurity is equal to the mass of the fermions, we find excellent agreement for the binding energy as well as the effective mass in the attractive case. For the repulsive case, which has not been considered in three dimensions, the agreement is less satisfactory, but this is easily understood. The other exactly soluble case is the one where the mass of the impurity is infinite. The problem reduces to the one-body problem of a static impurity interacting with a free Fermi sea, which we solve exactly. Once again the agreement of our approximate results with the exact ones is excellent. This overall agreement in the one-dimensional case brings a strong validation for our method applied in three dimensions. Moreover it provides an excellent approximation for the one-dimensional problem in the general case where the mass of the impurity is not simply related to the fermion mass.

ACKNOWLEDGMENTS

We are grateful to X. Leyronas for stimulating discussions. The Laboratoire de Physique Statistique is “Laboratoire associé au Centre National de la Recherche Scientifique et aux Universités Paris 6 et Paris 7.”

-
- [1] For a very recent review, see S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1215 (2008).
 [2] J. B. McGuire, *J. Math. Phys.* **7**, 123 (1966).
 [3] M. Gaudin, *Phys. Lett.* **24A**, 55 (1967).
 [4] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998); T. Bergeman, M. G. Moore, and M. Olshanii, *ibid.* **91**, 163201 (2003).
 [5] G. E. Astrakharchik, D. Blume, S. Giorgini, and L. P. Pitaevskii, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 050402 (2004); J. N. Fuchs, A. Recati, and W. Zwerger, *ibid.* **93**, 090408 (2004); I. V. Tokatly, *ibid.* **93**, 090405 (2004); C. Mora, A. Komnik, R. Egger, and A. O. Gogolin, *ibid.* **95**, 080403 (2005).
 [6] C. Lobo, A. Recati, S. Giorgini, and S. Stringari, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 200403 (2006).
 [7] S. Pilati and S. Giorgini, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 030401 (2008).
 [8] F. Chevy, *Phys. Rev. A* **74**, 063628 (2006).
 [9] R. Combescot, A. Recati, C. Lobo, and F. Chevy, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 180402 (2007).
 [10] N. V. Prokof'ev and B. Svistunov, *Phys. Rev. B* **77**, 020408(R) (2008).
 [11] N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. B* **77**, 125101 (2008).
 [12] R. Combescot and S. Giraud, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 050404 (2008).
 [13] At first this feature seems unphysical since it is apparently in violation of particle conservation. Actually one can see that for a finite system with size $2R$, particle conservation is satisfied. However the oscillations around n_\uparrow , necessary for this conservation, occur for larger and larger distance from the origin when R grows. Hence they are not present at a finite distance in the thermodynamic limit $R \rightarrow \infty$.

Analytical theory of the dressed bound state in highly polarized Fermi gases

R. COMBESCOT^(a), S. GIRAUD and X. LEYRONAS

Laboratoire de Physique Statistique^(b), Ecole Normale Supérieure - 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France, EU

received 23 September 2009; accepted in final form 2 December 2009
published online 8 January 2010

PACS 03.75.Ss – Degenerate Fermi gases
PACS 05.30.Fk – Fermion systems and electron gas
PACS 71.10.Ca – Electron gas, Fermi gas

Abstract – We present an analytical treatment of a single \downarrow -atom within a Fermi sea of \uparrow -atoms, when the interaction is strong enough to produce a bound state, dressed by the Fermi sea. Our method makes use of a diagrammatic analysis, with the involved diagrams taking only into account at most two particle-hole pairs excitations. The agreement with existing Monte Carlo results is excellent. In the BEC limit our equation reduces exactly to the Skorniakov and Ter-Martirosian equation. We present results for \uparrow - and \downarrow -atoms with different masses, which is of interest for experiments in progress.

Copyright © EPLA, 2009

Introduction. – The past few years have seen an intense exploration of the field of ultracold Fermi gases [1]. Quite recently it has turned toward very interesting and unexplored physical domains for superfluidity. Indeed it is possible to have stable mixtures of two fermionic species with different particle numbers [2–4] (called polarized gases) and also different masses. When quantum degeneracy is reached, these fermions may form Cooper pairs when there is a weak attractive interaction between atoms of different fermionic species, leading to BCS-like superfluidity. In the opposite regime of very strong attractive interaction these pairs are very tightly bound, forming essentially small molecules, and one obtains the Bose-Einstein condensation (BEC) of these resulting bosons. Thanks to the existence of Feshbach resonances [1], the strength of the attractive interaction can be essentially controlled at will experimentally and one can explore the whole extent of the so-called BEC-BCS crossover [1] between these two extreme regimes, where the overlap between the pairs goes from very small to very large. Polarization has been shown to be detrimental to superfluidity in this crossover, but one could also hope to discover new superfluid phases, like the FFLO phases [5,6], although experimental results are up to now negative in this respect.

A particularly attractive limiting case is the one of very strong polarization, which is at the same time easier to handle but provides also the possibility to understand quantitatively the physics at lower polarization [7–9]. This is the situation where a single fermion (say \downarrow -atom) with mass m_{\downarrow} is in the presence of a Fermi sea of another, say \uparrow , fermion species with mass $m \equiv m_{\uparrow}$, Fermi wave vector k_F and scattering length a between \uparrow - and \downarrow -atoms. In the absence of bound state, we have shown recently [10] that the exact solution of this problem is obtained as the limit of an extremely rapidly convergent series of approximations. These successive approximations amount to restrict the Hilbert space of the excited states of the system to one, two, \dots , n , \dots particle-hole pairs. In practice the first-order approximation, which coincides with the standard ladder approximation is already quite satisfactory. The second-order one, where at most two particle-hole pairs are coming in, gives an essentially exact answer, as it may be confirmed by comparison with QMC calculations, when available. Note that very recently the effective mass of this polaron has been measured experimentally at unitarity [11], with results in good agreement with theory [10,12].

In this paper we address analytically, by a diagrammatic extension of the above treatment, the case where the attractive interaction is strong enough to lead to a bound state, which is merely a molecule in the “BEC” limit of very strong attraction $k_F a \rightarrow 0_+$. This regime is of essential importance [9] for the understanding of the

^(a)E-mail: combesco@lps.ens.fr

^(b)The “Laboratoire de Physique Statistique” is “Laboratoire associé au Centre National de la Recherche Scientifique et aux Universités Paris 6 et Paris 7”.

whole phase diagram, since when the density of \downarrow -atoms increases, the corresponding bound states form a Bose-Einstein condensate. We will calculate in this regime the chemical potential and the effective mass, with results for the case of equal masses $m_\uparrow = m_\downarrow$ in remarkable agreement with known results from QMC calculations [9,13]. This allows us to provide accurate answers in the case of very high current interest where the mass ratio $r = m_\downarrow/m_\uparrow$ is different from 1. In the BEC limit our results are exact, since they reduce to the Skorniakov and Ter-Martirosian [14–16] equation.

Derivation of the equation. – In this section we sketch the derivation of our essential equations (2) and (3). This derivation will be provided in much more details in a long paper in preparation. The reader uninterested in these technical details may skip them and go to the next section, where we analyze eq. (3), and provide and discuss the results for the binding energy (obtained from eq. (3)) and the effective mass (obtained from eq. (2)).

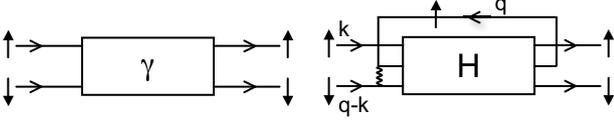
Since we have a single \downarrow -atom $N_\downarrow = 1$, we are, in the thermodynamic limit, just at the border between a zero density $n_\downarrow = 0$ and a non-zero density $n_\downarrow \neq 0$. Calculating this density by $n_\downarrow = \sum_{\mathbf{p}} \int (d\omega/2i\pi) G_\downarrow(\mathbf{p}, \omega)$, where the integration contour on ω encircles the $\text{Re } \omega < 0$ half-plane, this leads to the requirement that $G_\downarrow(\mathbf{p}, \omega)$ is analytic in this domain. But considering the evolution of its singularities when μ_\downarrow is increasing, starting from very large negative values, we reach the conclusion that, for $N_\downarrow = 1$, a singularity has reached $\omega = 0$. The simplest singularity to consider is just the explicit pole, corresponding to $G_\downarrow^{-1}(\mathbf{p}, 0) = G_{0\downarrow}^{-1}(\mathbf{p}, 0) - \Sigma(\mathbf{p}, 0) = \mu_\downarrow - E(p) - \Sigma(\mathbf{p}, 0) = 0$. Since the lowest energy for the \downarrow -atom is expected to occur for $\mathbf{p} = 0$, this leads to the expression $\mu_\downarrow = \Sigma(\mathbf{0}, 0)$ used in [12].

However there is also the possibility that the singularity arises from $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ itself. This is the case which is of interest for us, and it is well known to occur in the "BEC" limit $1/k_F a \rightarrow \infty$, where a strongly bound state arises between the \downarrow -atom and an \uparrow -atom. Quite generally the existence of a bound state will appear as a pole in the vertex corresponding to the scattering of the \downarrow -atom and an \uparrow -atom. From the relation between the self-energy and this vertex, one can see that a pole occurring for a negative value of the total energy Ω of the two atoms will automatically give rise to singularities of $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ for $\text{Re } \omega < 0$ and accordingly to $n_\downarrow \neq 0$. Hence, as it is physically obvious, we have to look for the chemical potential μ_\downarrow at which such a pole appears and compare it to the one corresponding to the condition found in the preceding paragraph. The lowest one will give the physical μ_\downarrow . Naturally the pole appears at zero energy $\Omega = 0$. Moreover, just as above, the limiting situation for the appearance of the \downarrow -atom is for $\omega = 0$, for the frequency variable in the self-energy. With respect to the momentum variables it is clear physically that the lowest energy for the pole is obtained when the total momentum

\mathbf{q} of the two atoms is zero. More precisely the dependence of the chemical potential on this momentum will give the effective mass, which is found positive in the physical range.

We make now the following approximation: in all the diagrams we draw, we restrict ourselves to have at most two explicit propagator lines corresponding to \uparrow -atoms running forward through the diagram. Naturally we have also the propagator line of our single \downarrow -atom which runs forward throughout the diagram. We could generalize to 3, 4 \dots explicit propagators, this series of approximations converging very rapidly to the exact result, just as in [10], but again the present approximation is quite enough. On completely general grounds all the diagrams we can draw for the vertex begin with an elementary interaction between our \downarrow -atom and an \uparrow -atom. However, since we let the strength g of this interaction go to zero $g \rightarrow 0$, we have to repeat this scattering an infinite number of times, any finite number giving a zero contribution. The summation of this series gives a factor $T_2(\mathbf{q}, \Omega)$, instead of the factor g we would have for a single interaction. It depends only on the total momentum \mathbf{q} and energy Ω of the two scattering atoms, and not on the variables of each atom separately. In vacuum we would have explicitly $T_2(\mathbf{q}, \Omega) = T_2^{(0)}(\mathbf{q}, \Omega) = (2\pi/m_r) [a^{-1} - \sqrt{2m_r(q^2/2M - \Omega)}]^{-1}$ (*i.e.* essentially the scattering amplitude of the two atoms with total mass M and reduced mass m_r), but here we have to calculate this quantity in the presence of the Fermi sea, with chemical potentials μ_\uparrow and μ_\downarrow . In a first-level approximation, where we would have at most a single propagator line for \uparrow -atoms, T_2 would be the only contribution. However at our second-level approximation, with two \uparrow -atoms propagators, we have also to consider processes where, as a first interaction or after T_2 , our single \downarrow -atom interacts with another \uparrow -atom.

Before proceeding let us consider first what happens when we calculate within our approximation the self-energy $\Sigma_\downarrow(\mathbf{0}, 0)$ relevant for the case without bound state [12]. In this case the essential difference is that, in order to obtain Σ from the vertex [17], we should not set $\Omega = 0$ but rather close all the diagrams by a \uparrow propagator running backward. This gives an additional factor $G_{0\uparrow}(\mathbf{q}, \Omega)$ and we have then to sum over \mathbf{q} and Ω . We sum over Ω by closing the Ω contour (which runs on the imaginary frequency axis) at infinity in the half-plane $\text{Re } \Omega < 0$. We do similarly for the other \uparrow propagator going backward. On the other hand, for all the explicit intermediate \uparrow propagators going forward (that is in the same direction as our entering \downarrow propagator), we close the contour in the $\text{Re } \omega > 0$ half-plane. It can then be seen that, due to the explicit \uparrow and \downarrow intermediate propagators, all the frequency integrations lead merely to on-the-shell evaluations for the remaining factors. This is naturally so only when these propagators give rise to poles in the corresponding frequency integration domain. Otherwise the result is zero. This leads to the constraint $k > k_F$ on the wave vectors for the forward propagators, and $q < k_F$


 Fig. 1: Diagrammatic representation of $\gamma_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$ and $H_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{q}'}$.

for the ones going backward. In this way we have been able to rederive exactly the equation ruling the self-energy in [10] and accordingly all the results of [10] for μ_\downarrow .

Coming back to our present problem, the only difference is that, instead of having the on-the-shell evaluation $\Omega = \epsilon_q - \mu_\uparrow$, with $\epsilon_{\mathbf{q}} = \mathbf{q}^2/2m$, we have merely to set $\Omega = 0$. In the following we will have this implicit understanding for the variable named \mathbf{q} . Otherwise, by proceeding in the same way as above, we will have on-the-shell evaluations for all the other frequency variables entering our diagrams, with the same constraints $k_i > k_F$ and $q_i < k_F$ on the momenta. Hence, since all the frequencies are determined in this way, we refer in the following only to the momentum variables.

We need to write a general equation for the vertex $\gamma_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ with entering momenta \mathbf{k} for the \uparrow -atom and $\mathbf{q} - \mathbf{k}$ for the \downarrow -atom (see fig. 1). Except for a factor, this quantity is actually quite similar to $\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ in [10], the essential difference being the $\Omega = 0$, instead of on-the-shell, value for the \mathbf{q} variable. A first contribution is naturally $T_2(\mathbf{q}, 0)$. However we have also the possibility that the first interaction of the \downarrow -atom is with another \uparrow -atom, with momentum \mathbf{q}' . For fixed value of \mathbf{q}' , we call this contribution $H_{\mathbf{k}\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ (see fig. 1). Since \mathbf{q}' is an internal variable, one has to sum over it to obtain the contribution to $\gamma_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$. Finally, after the repeated scattering described by $T_2(\mathbf{q}, 0)$, we have the possibility to have the processes described by H . These two parts will be linked by an \uparrow and a \downarrow propagator. Integration over the frequency of the \uparrow propagator gives a factor $-1/\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$ coming from the on-the-shell evaluation of the \downarrow one. In this way we obtain

$$\gamma_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = T_2(\mathbf{q}, 0) \left[1 + \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} \frac{H_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}}{\bar{E}_{\mathbf{k}'\mathbf{q}}^{(1)}} \right] - \sum_{\mathbf{q}'} H_{\mathbf{k}\mathbf{q}\mathbf{q}'} \quad (1)$$

with $\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)} = |\mu_\downarrow| + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_\uparrow$ and $E_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2m_\downarrow$, quite analogous to $E_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$ in [10].

We want to find under which conditions $\gamma_{\mathbf{k},0}$ diverges. This can naturally occur if $[T_2(\mathbf{0}, 0)]^{-1} = 0$, but this is just the first-level approximation. However this can also arise from a divergence of H , and we will look for the equation corresponding to this condition. Quite generally we have for γ and H a set of coupled linear equations. The divergence is obtained when there is a solution for the homogeneous part of these equations. In the following we retain only the terms contributing to this homogeneous part and we omit the other ones.

We have now to write for $H_{\mathbf{k}\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ an equation analogous to eq. (1). However, since we accept only two \uparrow propagators, we do not have to go to higher-order vertices, and our equation will be closed. First, the \downarrow -atom and \uparrow -atom, having a first interaction, will interact repeatedly, giving rise to a common factor $T_2(\mathbf{q} + \mathbf{q}' - \mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}})$. Then, after this process, we may have another H vertex, giving rise to a term completely analogous to the second one in eq. (1). However we have also the possibility that, after this repeated interaction, the involved \uparrow -atom recombines with a hole (this corresponds to closing the T_2 by a backward \mathbf{q}' propagator). Afterwards the \mathbf{q}' \uparrow -atom has disappeared and all the possible remaining processes are described by $\gamma_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$. There is a factor $-1/\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}$ coming from the propagator linking these two parts. Finally when we replace $\gamma_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ by its explicit expression from eq. (1), the first term does not contain H and is not retained. Hence, keeping only the homogeneous part of the equation, we obtain that the bound state appears when

$$[T_2(\mathbf{q} + \mathbf{q}' - \mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1} H_{\mathbf{k}\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{H_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}}{\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)}} - \frac{1}{\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}} \sum_{\mathbf{q}''} H_{\mathbf{k}\mathbf{q}\mathbf{q}''} + \frac{T_2(\mathbf{q}, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{(1)}} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}''} \frac{H_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}''}}{\bar{E}_{\mathbf{k}'\mathbf{q}}^{(1)}}, \quad (2)$$

with $\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{(2)} = |\mu_\downarrow| + E_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'-\mathbf{q}-\mathbf{q}'} + \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{q}} - \mu_\uparrow$. In this equation \mathbf{q} appears as a parameter and again the lowest energy bound state is obtained when $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Setting $H_{\mathbf{k},0,\mathbf{q}'} \equiv \bar{H}_{\mathbf{k}\mathbf{q}'}$ we find the following equation for the appearance of the lowest energy bound state:

$$[T_2(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \epsilon_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1} \bar{H}_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{H}_{\mathbf{k}'\mathbf{q}}}{\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{0}\mathbf{q}}^{(2)}} - \frac{1}{\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{0}}^{(1)}} \sum_{\mathbf{q}'} \bar{H}_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} + \frac{T_2(\mathbf{0}, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{0}}^{(1)}} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} \frac{\bar{H}_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'}}{\bar{E}_{\mathbf{k}'\mathbf{0}}^{(1)}}. \quad (3)$$

Bound-state energy and effective mass. – We show now analytically that, in the BEC limit, our equation leads systematically to the exact result, whatever the mass ratio r . In this BEC limit our equation simplifies since it can be seen as the limit $k_F \rightarrow 0$ at fixed a . Since by definition $q \leq k_F$, we are left with a function $\bar{H}_{\mathbf{k},0} \equiv h_{\mathbf{k}}$ of the single variable \mathbf{k} (actually only of its modulus for symmetry reasons). Then the summation over \mathbf{q}' in the last two terms of eq. (3) gives merely a factor $n_\uparrow = k_F^3/(6\pi^2)$. On the other hand, when we compare the first two terms in the right-hand side of eq. (3), the only difference is that the typical range for the summation over \mathbf{k}' is $k' \sim 1/a$ (as can be seen explicitly below) while it is $q' \sim k_F$ for the summation over \mathbf{q}' , as we have just seen. Hence the second term is of order $(k_F a)^3$ compared to the first, and accordingly completely negligible in the BEC limit (actually we find numerically that, even for the lowest relevant values of $1/k_F a$ this term gives a very small

contribution). Accordingly we are left with

$$[T_2(\mathbf{k}, -\epsilon_k)]^{-1} h_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{h_{\mathbf{k}'}}{\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'00}^{(2)}} + \frac{k_F^3}{6\pi^2} \frac{T_2(\mathbf{0}, 0)}{\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{0}}^{(1)}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{h_{\mathbf{k}'}}{\bar{E}_{\mathbf{k}'0}^{(1)}}. \quad (4)$$

We are looking for a solution with the form $\rho \equiv |\mu_{\downarrow}|/E_F = \epsilon_b/E_F + 1 + \beta(m/m_r)k_F a$ which is an expansion in powers of $k_F a$, with $\epsilon_b = 1/2m_r a^2$ the molecule binding energy and $E_F = k_F^2/2m$ the Fermi energy. Taking into account the general expression of $T_2(\mathbf{k}, \omega)$ which gives $[m_r T_2(\mathbf{0}, 0)/(2\pi a)]^{-1} = 1 - (2k_F a/\pi)[1 + \sqrt{(\rho - 1)m_r/m} \arctan(\sqrt{(\rho - 1)m_r/m})]$ and substituting the expansion for ρ gives the expansion $[m_r T_2(\mathbf{0}, 0)/(2\pi a)]^{-1} = -(k_F a)^3[\beta/2 + 2/(3\pi)]$. The lowest-level approximation corresponds to write $[T_2(\mathbf{0}, 0)]^{-1} = 0$. This leads to $\beta = -4/(3\pi)$ which corresponds to the Born approximation for the \uparrow -atom-dimer scattering length.

While in the BEC limit we have, in the last term of eq. (4), to evaluate $T_2(\mathbf{0}, 0)$ carefully since it is large, all the other terms can be evaluated to lowest order. Hence we set $|\mu_{\downarrow}|/E_F = (m/m_r)/(k_F a)^2$ in $\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{0}}^{(1)} = |\mu_{\downarrow}| + k^2/2m_r$ and in $\bar{E}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'00}^{(2)} = |\mu_{\downarrow}| + (\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2/2m_{\downarrow} + (k^2 + k'^2)/2m$. Similarly we have $[m_r T_2(\mathbf{k}, -\epsilon_k)/(2\pi a)]^{-1} = 1 - \sqrt{1 + R(ka)^2}$, where $R = m_r/m_r^T$ is the ratio of m_r to the reduced mass $m_r^T = m(m + m_{\downarrow})/(2m + m_{\downarrow})$ of the \uparrow -atom-dimer system ($R = 3/4$ for equal masses). We take the reduced variable $\mathbf{x} = a\mathbf{k}$ and make the change of function $h(\mathbf{k}) = C f(x)/x^2$ where C is a constant to be determined just below. We find from eq. (4)

$$\begin{aligned} \pi R \left[1 + \sqrt{1 + R x^2} \right]^{-1} f(x) = \\ -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dy \int d\Omega_{\mathbf{y}} \frac{f(y)}{1 + x^2 + y^2 + R' \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}} \\ + \frac{8}{4 + 3\pi\beta} \frac{1}{1 + x^2} \int_0^{\infty} dy \frac{f(y)}{1 + y^2}, \end{aligned} \quad (5)$$

where $R' = 2m_r/m_{\downarrow}$ and the angular average over \mathbf{y} can be easily performed. We can choose C so that $f(0) = -3\pi\beta/(2R)$. Then, writing eq. (5) for $x=0$, we find that the coefficient of $1/(1 + x^2)$ (including the integral) in the last term of eq. (5) is just equal to π . Hence eq. (5) coincides exactly with the equation, suitably generalized to the case of unequal masses, found by Skorniakov and Ter-Martirosian [14] for the scattering amplitude to obtain the fermion-dimer scattering length a_3 . Solving eq. (5) provides the exact result for $a_3 = a f(0)$. From the above relation this gives $\beta = -2R a_3/(3\pi a)$. When this is inserted in the above expression for $|\mu_{\downarrow}|$, we obtain a contribution $-2\pi n_{\uparrow} a_3/m_r^T$ from the fermion-dimer scattering, which is precisely the one resulting from a mean-field argument, exact in this limit. Hence our equation provides the exact answer in the BEC limit by reducing to the Skorniakov and Ter-Martirosian equation [14–16].

We have solved numerically eq. (3) in the general case. The results for μ_{\downarrow} are given in fig. 2, or rather we plot

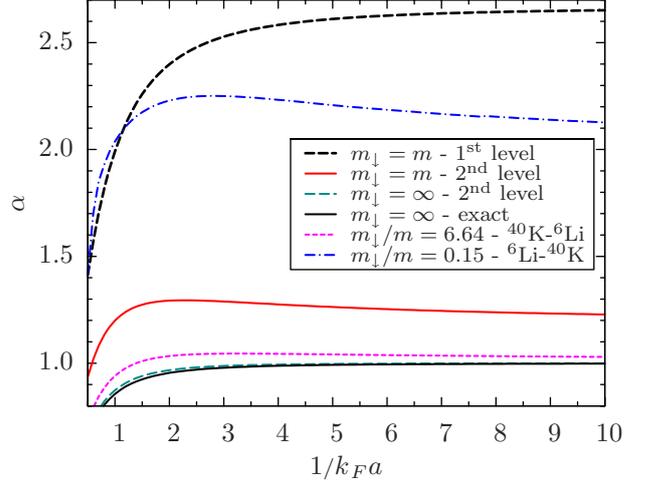


Fig. 2: (Colour on-line) Reduced chemical potential $\alpha \equiv (3\pi m_r^T/2m E_F k_F a) (\epsilon_b + E_F - |\mu_{\downarrow}|)$ as a function of $1/k_F a$ for various mass ratios.

$\alpha \equiv (3\pi m_r^T/2m E_F k_F a) (\epsilon_b + E_F - |\mu_{\downarrow}|)$ which reduces to a_3/a in the BEC limit and allows to magnify small differences. For equal masses $m_{\downarrow} = m$ we find that, basically down to $1/k_F a \sim 2$, α is essentially constant, almost equal to its BEC value $a_3/a = 1.18$ (we display also the first-level result $[T_2(\mathbf{0}, 0)]^{-1} = 0$ which goes to the Born result $a_3/a = 8/3$ in the BEC limit). This is exactly what is found by QMC calculations [9,13]. More precisely we find the actual value of α is slightly higher, the decrease toward the BEC limit being quite slow, behaving as $k_F a$. We also find that the bound state appears for $1/k_F a \simeq 0.88$ in perfect agreement with QMC [13] (all the more remarkable since the two chemical potential curves for the polaron and the bound state cross at a very small angle, which makes this value quite sensitive). Another very striking check of the precision of our results is found for $m_{\downarrow} = \infty$, where the exact result is known [12]. For most of the range the agreement for α is within a few 10^{-3} and the difference is barely seen even in our blown up fig. 2. A very interesting feature of this limit is that the convergence toward the BEC result $\alpha = 1$ is as $(k_F a)^2$, faster than in the general case. This allows to understand qualitatively why, for the equal mass case, which is not much different, one obtains also a fairly slow variation. The case of physical interest $r = 6.64$ for the $^{40}\text{K}-^6\text{Li}$ mixture is also shown and is actually very close to this limit. We display also the $r = 1/6.64 \simeq 0.15$ result. Note finally that, in agreement with [10], the quite simple $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ approximation of eq. (3) gives results in fairly good agreement with our exact numerical treatment.

Finally let us turn to our results for the effective mass m^* . Naturally we always obtain that, in the BEC limit, the effective mass of the bound state is equal to the molecular mass $M = m_{\downarrow} + m$. In fig. 3 we display our results for the inverse ratio of the effective mass to the bare mass m_{\downarrow}/m^* , in the case of equal masses $m_{\downarrow} = m$. We see that the effective mass increases when one goes away from this BEC limit. This is physically reasonable since in general

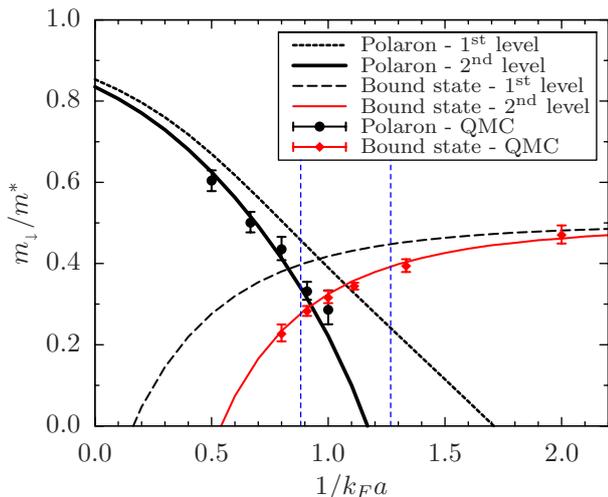


Fig. 3: (Colour on-line) Case $m_{\downarrow} = m$. Reduced inverse effective mass m_{\downarrow}/m^* of the polaron and of the bound state as a function of $1/k_F a$, at the first- and second-level approximations. The dashed lines indicate the location of the appearance of the bound state, both at the first-level $1/k_F a \simeq 1.27$ and the second-level $1/k_F a \simeq 0.88$ approximations.

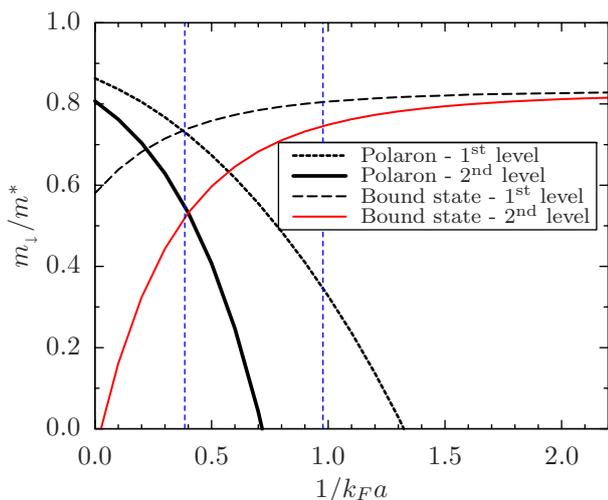


Fig. 4: (Colour on-line) Case $m_{\downarrow} = 5m$. Reduced inverse effective mass m_{\downarrow}/m^* of the polaron and of the bound state as a function of $1/k_F a$, at the first- and second-level approximations. The dashed lines indicate the location of the appearance of the bound state, both at the first-level $1/k_F a \simeq 0.98$ and the second-level $1/k_F a \simeq 0.38$ approximations.

more \uparrow -atoms are involved in the dressing of the \downarrow -atom, rather than a single one corresponding to the molecular state as it happens in the BEC limit. The agreement with diagrammatic QMC results [13] is again quite remarkable, both on the polaron side and on the bound-state side. Our results for $m_{\downarrow} = 5m$ and $m_{\downarrow} = 0.5m$ are shown respectively in fig. 4 and fig. 5. Note that when the effective mass is calculated beyond the transition from the polaron to the bound state, m_{\downarrow}/m^* becomes eventually negative, as seen in fig. 3, fig. 4 and fig. 5, which signals an instability. As

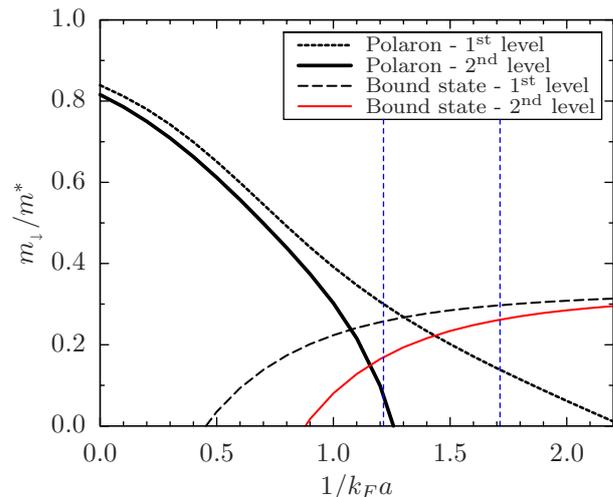


Fig. 5: (Colour on-line) Case $m_{\downarrow} = 0.5m$. Reduced inverse effective mass m_{\downarrow}/m^* of the polaron and of the bound state as a function of $1/k_F a$, at the first- and second-level approximations. The dashed lines indicate the location of the appearance of the bound state, both at the first-level $1/k_F a \simeq 1.72$ and the second-level $1/k_F a \simeq 1.22$ approximations.

expected physically the polaron-to-bound-state transition happens before the occurrence of this instability. For $m_{\downarrow} = \infty$ the bound state appears naturally for $1/k_F a = 0$. On the other hand, when one gets to lighter m_{\downarrow} , the transition value for $1/k_F a$ goes toward higher and higher values. This evolution is clear from fig. 4, fig. 3 and fig. 5. It is already seen easily at our first-level approximation which although not accurate is nevertheless qualitatively correct.

Conclusion. – In conclusion we have presented a diagrammatic analysis of the many-body problem of a single \downarrow -atom immersed in a Fermi sea of \uparrow -atoms. In this paper we have handled the case where the attractive interaction between the \downarrow -atom and \uparrow -atoms is strong enough to lead to a bound state. However we have indicated that our method allows to recover preceding results regarding the case of a weaker interaction where a polaron is formed without any bound state. Hence our technique provides a unified treatment of the problem across the whole BEC-BCS crossover.

Here we have taken into account at most two particle-hole pairs excitations, but the method could be extended to higher numbers. However comparison with existing Monte Carlo results as well as with known exact results is excellent, and there is presently no need to go to higher order. Hence our equation provide an essentially exact analytical description of the molecular state dressed by a Fermi sea. Consistently, in the BEC limit, our equation reduces exactly to the Skorniakov and Ter-Martirosian equation.

Specifically we have calculated the chemical potential and the effective mass of the \downarrow -atom, not only when the masses of the \uparrow - and \downarrow -atoms are equal, but also when they are different, which is of high interest for experiments

in progress on mixtures of different fermionic gases, for example mixtures of ${}^6\text{Li}$ and ${}^{40}\text{K}$.

Additional remark: After this work was completed and posted as arXiv:0907.3197, we have become aware of independent works addressing the same bound-state problem by Mora and Chevy, arXiv:0908.0608, and by Punk, Dumitrescu and Zwerger, arXiv:0908.1343.

REFERENCES

- [1] For a very recent review, see GIORGINI S., PITAEVSKII L. P. and STRINGARI S., *Rev. Mod. Phys.*, **80** (2008) 1215.
- [2] PARTRIDGE G. B., LI W., KAMAR R. I., LIAO Y. and HULET R. G., *Science*, **311** (2006) 503.
- [3] SHIN Y., ZWIERLEIN M. W., SCHUNCK C. H., SCHIROTZEK A. and KETTERLE W., *Phys. Rev. Lett.*, **97** (2006) 030401.
- [4] SHIN Y., SCHUNCK C. H., SCHIROTZEK A. and KETTERLE W., *Nature*, **451** (2008) 689.
- [5] FULDE P. and FERRELL R. A., *Phys. Rev.*, **135** (1964) A550.
- [6] LARKIN A. I. and OVCHINNIKOV Y. N., *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **47** (1964) 1136 (*Sov. Phys. JETP*, **20** (1965) 762).
- [7] LOBO C., RECATI A., GIORGINI S. and STRINGARI S., *Phys. Rev. Lett.*, **97** (2006) 200403.
- [8] RECATI A., LOBO C. and STRINGARI S., *Phys. Rev. A*, **78** (2008) 023633.
- [9] PILATI S. and GIORGINI S., *Phys. Rev. Lett.*, **100** (2008) 03040.
- [10] COMBESCOT R. and GIRAUD S., *Phys. Rev. Lett.*, **101** (2008) 050404.
- [11] NASCIMBÈNE S., NAVON N., JIANG K., TARRUELL L., TEICHMANN M., MCKEEVER J., CHEVY F. and SALOMON C., *Phys. Rev. Lett.*, **103** (2009) 170402.
- [12] COMBESCOT R., RECATI A., LOBO C. and CHEVY F., *Phys. Rev. Lett.*, **98** (2007) 180402.
- [13] PROKOF'EV N. V. and SVISTUNOV B. V., *Phys. Rev. B*, **77** (2008) 020408; 125101.
- [14] SKORNIKOV G. V. and TER-MARTIROSIAN K. A., *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **31** (1956) 775 (*Sov. Phys. JETP*, **4** (1957) 648).
- [15] PETROV D. S., *Phys. Rev. A*, **67** (2003) 010703.
- [16] ISKIN M. and SA DE MELO C. A. R., *Phys. Rev. A*, **77** (2008) 013625.
- [17] For a general introduction to many-body effects, see, for example, FETTER A. L. and WALECKA J. D., *Quantum Theory of Many- Particle Systems* (McGraw-Hill, New York) 1971.

Résumé

Cette thèse traite du problème à $N+1$ corps dans les gaz de fermions ultrafroids fortement polarisés. Il s'agit de la situation où un unique atome d'une espèce de spin est immergé dans une mer de Fermi d'atomes de l'autre espèce.

La première partie utilise une approche hamiltonienne basée sur un développement général de la fonction d'onde du système faisant intervenir un nombre arbitraire de paires particule-trou. Nous montrons que la série d'approximations successives construite converge très rapidement et nous obtenons ainsi une solution essentiellement exacte pour l'énergie et la masse effective du polaron. En dimension 1, dans deux cas particuliers, ce problème peut être résolu analytiquement. La comparaison avec notre série d'approximations est excellente et confirme l'efficacité de ce développement. Enfin, nous précisons les différents cas limites, ainsi que l'influence du rapport des masses entre les deux espèces de spin.

Dans une deuxième partie, nous utilisons le formalisme des diagrammes de Feynman pour décrire à la fois le polaron et l'état lié. Pour le polaron, nous construisons une théorie équivalente à l'approche hamiltonienne. Pour l'état lié, nous obtenons à nouveau une série d'approximations dont la convergence très rapide vers la solution exacte est parfaitement comprise. Cette approche nous fournit donc une solution quasi-exacte au problème tout au long de la transition BEC-BCS. Enfin, en comparant les énergies des deux quasi-particules, nous étudions la position de la transition polaron - état lié.

Mots-clés : gaz de fermions ultrafroids – phase normale polarisée – transition BEC-BCS – problème à $N+1$ corps – transition polaron - état lié – développement diagrammatique

Abstract

This thesis deals with the $N+1$ body problem in highly polarized Fermi gases. This is the situation where a single atom of one spin species is immersed in a Fermi sea of atoms of the other species.

The first part uses a Hamiltonian approach based on a general expansion for the wave function of the system with any number of particle-hole pairs. We show that the constructed series of successive approximations converges very rapidly and thus we get an essentially exact solution for the energy and the effective mass of the polaron. In one dimension, for two particular cases, this problem can be solved analytically. The excellent agreement with our series of approximations provides a further check of the reliability of this expansion. Finally, we consider more specifically various limiting cases, as well as the effect of the mass ratio between the two spin species.

In the second part, we use the Feynman diagrams formalism to describe both the polaron and the bound state. For the polaron, we develop a theory which is equivalent to the Hamiltonian approach. For the bound state, we get again a series of successive approximations whose fast convergence is perfectly understood. Therefore, this approach provides an essentially exact solution to the problem along the whole BEC-BCS crossover. Finally, by comparing the energies of the two quasi-particles, we study the position of the polaron to bound state transition.

Keywords: ultracold Fermi gases – polarized normal phase – BEC-BCS crossover – $N+1$ body problem – polaron to bound state transition – diagrammatic expansion