



Contribution à la mécanique statistique quantique des gaz froids

Jean-Noël Fuchs

► To cite this version:

Jean-Noël Fuchs. Contribution à la mécanique statistique quantique des gaz froids. Matière Condensée [cond-mat]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2003. Français. NNT : . tel-00002960v2

HAL Id: tel-00002960

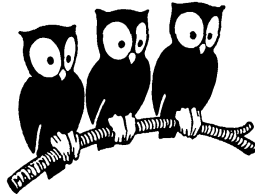
<https://theses.hal.science/tel-00002960v2>

Submitted on 10 Jun 2003

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.

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE DE
L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE
LABORATOIRE KASTLER BROSSEL



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI
spécialité : Physique Théorique

présentée par
Jean-Noël FUCHS

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Université Paris VI

Sujet de la thèse :

CONTRIBUTION À
LA MÉCANIQUE STATISTIQUE QUANTIQUE
DES GAZ FROIDS

Soutenue le 4 juin 2003 devant le jury composé de :

M. B. CASTAING	Rapporteur
M. R. COMBESCOT	Examineur
M. F. LALOË	Directeur de thèse
M. W. ZWERGER	Examineur

A Bénédicte.

Remerciements

Contrairement à ce que je croyais avant d'en faire personnellement l'expérience, une thèse n'est pas l'oeuvre solitaire d'un ermite. Le travail présenté dans ce manuscrit est le fruit de collaborations et d'échanges fréquents, et j'aimerais remercier ici les nombreuses personnes qui m'ont apporté leur aide.

En premier lieu, je tiens à exprimer toute ma gratitude à Franck Laloë qui a encadré cette thèse et m'a permis, au cours de nombreuses discussions, d'apprendre beaucoup sur la physique. Il a fait preuve d'une grande patience et a su m'éviter bien des fois de m'aventurer dans des zones marécageuses. Dima Gangardt, qui a effectué un séjour post-doctoral au laboratoire, a partagé mon bureau durant la thèse. Nos conversations quotidiennes ont été très fructueuses et une grande part du travail présenté dans ce manuscrit a été faite avec sa collaboration. Je le remercie sincèrement pour l'aide qu'il m'a apportée.

J'ai également profité de discussions avec de nombreux autres physiciens du département ou d'ailleurs : Roland Combescot et Xavier Leyronas qui m'ont offert de collaborer avec eux, Bill Mullin, Gordon Baym, Jamie Williams, Leonid Levitov, Markus Holzmann et bien d'autres. Je leur suis reconnaissant d'avoir passé du temps à m'expliquer ce qu'ils savent. Je tiens également à remercier Bill Mullin et Bernard Castaing qui ont accepté d'être les rapporteurs de cette thèse, ainsi que les autres membres du jury, Roland Combescot et Wilhelm Zwerger, qui se sont intéressés à ce travail.

Le petit noyau de théoriciens que nous formons avec Franck et Dima vit au sein du groupe "fluides quantiques". C'est dans cet environnement que se déroule la vie quotidienne faite de discussions scientifiques, politiques et autres autour du café ou du thé, de repas au pot et d'anniversaires arrosés (légèrement). Je remercie donc les "fluides quantiques" : Pierre-Jean Nacher, Geneviève Tastevin ("les chefs"), Alice Sinatra, Jamal Choukeife, Manu Courtade, Nathalie Piegay, Chris Bidinosti, Markus Holzmann, Marie Abboud.

Dans le laboratoire, de nombreuses personnes m'ont aidé (que ce soit pour remplir un bon de commande ou plus fréquemment pour réparer un ordinateur) : Zaïre Dissi, Daniel Lemoal, Io Perennes, Linda Krikorian, Vera da Costa, Thierry Tardieu, et bien d'autres. Merci à elles. Et puis, il y a les copains du labo, ceux qui savent sourire même lorsque l'on parle de choses "sérieuses" : Iacopo Carusotto, Carlos Lobo, Christophe Mora, Alberto Rosso, Sébastien Steiner, Xavier

Brokmann, Julien Gabelli, Jérémie Léonard, Guilhelm Semerijan, Grégory Schehr, Cyriaque Genet, Laurent Longchambon, Rémy Battesti, Jean-Philippe Karr, Philippe Hyafil, Olivier Prévoté et j'en oublie. Merci aussi à Laurent Hilico de m'avoir guidé à l'université d'Evry.

Pour finir, je voudrais remercier tous ceux qui font que la vie ne se réduit pas à la physique : mes copains de Strasbourg, de Paris, de Nice, d'Utrecht, de Lyon, de Mulhouse, de Singapour, d'Atlanta, de Heidelberg, du Creusot, de Marseille et d'ailleurs. Je n'oublie pas, bien sûr, mes parents ("merci papa, merci maman, tous les ans je voudrais que ça recommence..."), mon frère, ma soeur et sa maman, ainsi que les autres membres de la famille. Finalement, un grand merci à Bénédicte pour son soutien et son amour.

Table des matières

Introduction	11
I Propriétés de transport des gaz froids	15
1 Equation cinétique d'un gaz froid avec niveaux internes	19
1.1 Gaz froid avec niveaux internes	20
1.2 Méthodes collisionnelles	21
1.2.1 Interactions indépendantes du spin	22
1.2.2 Interactions dépendantes du spin	27
1.3 Approximation du champ moyen	33
1.4 Discussion	35
1.5 Appendice : Calcul de la transformée de Wigner de l'équation cinétique opératorielle	36
1.6 Appendice : Comparaison des ansatz de matrice S et d'Yvon-Snider	42
1.6.1 Termes linéaires en la matrice T	42
1.6.2 Termes quadratiques en la matrice T	43
1.6.3 Conclusion	45
1.7 Appendice : Remarques sur le champ moyen	45
2 Ondes de spin dans un gaz froid polarisé	47
2.1 Effet de rotation des spins identiques	48
2.2 Expérience de "séparation des états de spin"	49
2.3 Théorie cinétique	52
2.4 Ondes de spin de grande amplitude, non-hydrodynamiques	59
2.5 Décroissance du phénomène	64
2.6 Paquet d'onde "fantôme" et décohérence	67
2.7 Appendice : Paquet d'onde "fantôme"	68
3 Instabilité de Castaing dans un gaz froid piégé	71
3.1 Instabilité de Castaing : théorie hydrodynamique	71
3.2 Gaz froid piégé : théorie cinétique	73
3.2.1 Equation cinétique et solution numérique	74
3.2.2 Discussion	76

3.3	Conclusion	79
4	Modes hydrodynamiques du gaz de Bose unidimensionnel piégé	81
4.1	Le gaz de Bose 1D piégé à $T = 0$	82
4.2	Hydrodynamique	85
4.3	Modes hydrodynamiques : modèles exactement solubles	86
4.4	Correction au premier ordre	90
4.5	Modes hydrodynamiques du gaz de Bose 1D piégé	90
4.6	Conclusion	97
4.7	Appendice : Profil de densité	97
II	Propriétés d'équilibre des gaz froids denses	101
5	Développement en agrégats dans les gaz dilués	105
5.1	Mécanique classique	106
5.1.1	Fonction de Mayer	106
5.1.2	Développement diagrammatique	108
5.1.3	Equation d'état : premiers ordres du développement du Viriel	110
5.2	Mécanique quantique	111
5.2.1	Opérateurs d'Ursell et opérateurs de cycle d'échange	111
5.2.2	Développement diagrammatique	113
6	Développement en agrégats dans les gaz denses	117
6.1	Mécanique classique	118
6.1.1	Equation d'état	118
6.1.2	Diagrammes réductibles en arbre : champ moyen	120
6.1.3	Résumé	124
6.2	Mécanique quantique	124
6.2.1	Statistique de Boltzmann	125
6.2.2	Statistique de Bose/Fermi	137
6.3	Conclusion	145
A	Fraction condensée et statistique des cycles d'échange d'un condensat de Bose-Einstein	147
A.1	Taille des cycles	148
A.1.1	Gaz parfait	149
A.1.2	Gaz en interaction	150
A.2	Enroulements des cycles	152
A.2.1	Fraction superfluide et nombre d'enroulement	153
A.2.2	Fraction condensée et fraction enroulée	154

B	Tentative d'étude de la transition superfluide d'un gaz de Fermi attractif avec la méthode des opérateurs d'Ursell	161
B.1	Fonctions de Green à température finie	162
B.2	Méthode des opérateurs d'Ursell	165
B.3	Conclusion	167
	Conclusion	169
	Publications	171
A	Ursell operators in statistical physics of dense systems : the role of high order operators and exchange cycles	173
B	Internal state conversion in ultracold gases	191
C	Castaing's instability in a trapped ultracold gas	197
D	Large amplitude spin waves in ultracold gases	205
E	Hydrodynamic modes of a 1D trapped Bose gas	239
	Bibliographie	257

Introduction

La mécanique statistique étudie les propriétés des systèmes macroscopiques, c'est-à-dire des systèmes constitués d'un grand nombre de particules. On la sépare traditionnellement en deux branches : la mécanique statistique hors d'équilibre et la mécanique statistique à l'équilibre. La première étudie la dynamique d'évolution vers l'équilibre, alors que la deuxième concerne les propriétés de l'état macroscopique d'équilibre.

Au cours de cette thèse, je me suis intéressé à divers aspects de la mécanique statistique (hors d'équilibre et à l'équilibre) des gaz froids. Les gaz froids sont des systèmes dont la température T est suffisamment basse pour que la mécanique quantique joue un rôle important dans les propriétés d'équilibre et de transport. D'une part, la statistique quantique (bosonique ou fermionique) intervient dès que la longueur d'onde thermique de de Broglie $\lambda_T = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T}$ devient plus grande que la distance moyenne entre les particules du gaz ; les propriétés d'équilibre du gaz sont alors modifiées, comme en témoigne, par exemple, la transition de phase de Bose-Einstein dans un gaz dilué de Bose ou l'existence d'une pression cinétique dans un gaz de Fermi à basse température. D'autre part, les propriétés de transport du gaz sont modifiées lorsque les collisions binaires entre particules ont lieu dans le régime quantique, où apparaissent les "effets de diffraction", qui se produisent dès que la longueur d'onde thermique devient plus grande que la longueur de diffusion¹. Dans un gaz dilué, lorsqu'on baisse la température, on atteint le régime de collision quantique avant celui de dégénérescence.

L'intérêt de l'étude théorique des gaz froids s'est renforcé depuis qu'il a été possible de confiner des gaz atomiques ultrafroids (i.e. dont la température est dans la gamme des microKelvins) dans des pièges magnétiques ou optiques [1]. Ces systèmes sont bien contrôlés et caractérisés expérimentalement, ce qui permet de connaître précisément le Hamiltonien à la base de leur description théorique. Comme il est possible d'écrire un modèle sans paramètre ajustable, la comparaison entre théorie et expérience peut être quantitative. Par exemple, à la fin de 2001, l'équipe de Cornell au JILA a réalisé une expérience surprenante sur un gaz peu dégénéré de ^{87}Rb [2] : le gaz atomique initialement à l'équilibre dans un piège est soumis à une impulsion radio-fréquence $\pi/2$ qui couple deux niveaux in-

¹La longueur de diffusion caractérise entièrement les collisions entre particules dans la limite de basse énergie.

ternes, déclenchant une rapide ségrégation entre atomes dans les niveaux internes différents, avant que le gaz ne retourne définitivement à l'équilibre. Comprendre le mécanisme physique à l'origine de ce phénomène a constitué la motivation initiale de mon travail de thèse sur le transport dans les gaz froids polarisés. On peut en effet modéliser le système expérimental par un gaz froid non-dégénéré dont les particules possèdent un spin (ou un pseudo spin) $1/2$, reproduisant les deux niveaux internes. En généralisant la théorie cinétique de Lhuillier et Laloë [3], nous avons pu écrire une équation de transport qui prend correctement en compte le champ moyen existant dans un gaz dilué polarisé de spin. Cette équation inclut notamment le champ moyen de spin, qui résulte de l'effet de rotation des spins identiques (ISRE) dont l'origine physique est la suivante : au cours d'une collision binaire vers l'avant, l'indiscernabilité quantique des partenaires de collision fait tourner les spins autour de leur somme ; dans un gaz, l'effet cumulé de nombreuses collisions vers l'avant est alors équivalent à la présence d'un champ magnétique effectif ou champ moyen de spin proportionnel à la polarisation locale de spin. En résolvant numériquement, et en partie analytiquement, l'équation cinétique obtenue, nous avons pu expliquer l'expérience du JILA [2] et montrer que le phénomène de ségrégation observé était dû à la présence d'ondes de spin de grande amplitude dans le gaz atomique. Une explication similaire a été fournie simultanément par Oktel et Levitov [4] ainsi que par Williams, Nikuni et Clark [5].

L'observation d'ondes de spin dans un gaz non-dégénéré n'est pas nouvelle. A la suite de leur prédiction théorique, au début des années 80, par Bashkin [6] et par Lhuillier et Laloë [7], des ondes de spin nucléaire de faible amplitude avaient déjà été détectées dans d'autres systèmes polarisés : $H\downarrow$ gazeux [8], solution d' $^3He\uparrow$ dilué dans de l' 4He superfluide [9] et $^3He\uparrow$ gazeux [10]. A la même époque, Castaing a montré qu'en présence d'un fort gradient initial de polarisation de spin longitudinale, les ondes de spin transverse apparaissent spontanément [11]. Cette instabilité hydrodynamique est une autre manifestation de l'effet de rotation des spins identiques (ISRE). Kuklov et Meyerovich [12] ont suggéré que cette instabilité pourrait également être présente dans un gaz froid piégé. En résolvant numériquement une équation de transport, nous avons pu montrer que c'est effectivement le cas – même lorsque le gaz est relativement loin du régime hydrodynamique. Nous avons aussi proposé une expérience sur un gaz atomique ultrafroid dans lequel l'apparition spontanée d'ondes de spin transverse via l'instabilité de Castaing est déclenchée par une résonance de Feshbach – i.e. une modification de la longueur de diffusion interatomique par un champ magnétique. Ce phénomène n'a pas encore été observé expérimentalement.

Par la suite, je me suis intéressé au transport dans un gaz de Bose unidimensionnel à température nulle. Bien que la physique à une dimension d'espace puisse apparaître comme un sujet théorique d'intérêt un peu académique, il se trouve que des équipes expérimentales ont récemment réussi à confiner des gaz atomiques ultrafroids dans des pièges tellement allongés que la dynamique devient effectivement

unidimensionnelle [13, 14, 15]. Il est alors très utile de caractériser ces systèmes par leurs modes collectifs d'oscillation dans le piège [16]. Combescot et Leyronas [17] ont imaginé une méthode permettant de résoudre les équations linéarisées de l'hydrodynamique des gaz, à température nulle, à partir de l'équation d'état et de calculer les fréquences des modes collectifs. En développant cette méthode, nous avons pu obtenir les modes hydrodynamiques du gaz de Bose unidimensionnel, à température nulle, quelle que soit l'intensité des interactions entre bosons. Les résultats confirment ceux de Menotti et Stringari [18], qui utilisent une approche différente.

Durant ma thèse, je me suis également intéressé aux propriétés d'équilibre des gaz froids. Ces propriétés sont entièrement contenues dans la fonction de partition. Par exemple, l'équation d'état – qui, à température fixée, lie la pression à la densité du gaz – s'obtient simplement en dérivant la fonction de partition par rapport au volume du gaz. Lorsque le gaz est dilué, il est possible de développer la fonction de partition en puissances du petit paramètre nb^3 , que constitue la densité n mesurée en unités de la portée b du potentiel d'interaction, et de tronquer le développement. On parle de développement en agrégats – un agrégat étant un groupe de particules liées par les interactions et correspondant à une contribution bien définie à la fonction de partition. Pour un gaz dilué, il suffit de ne garder dans le développement de la fonction de partition que les agrégats contenant peu de particules. Lorsque la densité augmente, les corrélations entre particules deviennent plus fortes et les interactions jouent un rôle de plus en plus important. Si le paramètre de dilution nb^3 devient de l'ordre de l'unité, il n'est plus possible de tronquer le développement et il faut prendre en compte les agrégats les plus grands. Mayer [19] a proposé une méthode qui permet de resommer les agrégats de toutes les tailles en les rangeant par classes d'irréductibilité. Il a ainsi pu obtenir l'expression exacte de tous les coefficients du Viriel² de l'équation d'état en mécanique classique. En mécanique quantique, le problème se complique singulièrement à cause de l'indiscernabilité des particules, qui permet leur échange. Grüter et Laloë [20] ont développé une théorie quantique diagrammatique – appelée méthode des opérateurs d'Ursell – qui permet d'écrire la fonction de partition d'un gaz dilué à partir d'agrégats de particules liées par des interactions et des cycles d'échange. Ces derniers tiennent compte de la statistique quantique. La méthode des opérateurs d'Ursell a, par exemple, été utilisée par Holzmänn *et al* [21] pour calculer la modification de la température de condensation de Bose-Einstein d'un gaz dilué en interaction. L'objectif de mon travail de thèse a été d'étendre la méthode des opérateurs d'Ursell à des systèmes qui ne sont pas dilués et dont le développement quantique en agrégats ne peut donc être tronqué. En introduisant une classe particulière de diagrammes – appelés diagrammes en arbre – qui ont la propriété de construire une exponentielle, nous avons réussi à généraliser des résultats du développement classique en agrégats,

²Le développement du Viriel est l'écriture de l'équation d'état du gaz sous la forme d'une série entière de la densité, dont les coefficients sont appelés coefficients du Viriel.

tel que le développement du Viriel de l'équation d'état d'un gaz dense, au cas quantique.

Dans le formalisme des opérateurs d'Ursell, la condensation de Bose-Einstein (BEC) d'un gaz de Bose dilué est liée à l'apparition de cycles d'échange macroscopiques, i.e. impliquant presque toutes les particules du gaz. Dans ce langage, nous avons étudié le lien entre la statistique des cycles d'échange et la fraction condensée d'un condensat de Bose-Einstein, dans la lignée du travail de Pollock et Ceperley sur la fraction superfluide [22]. Dans un gaz de Fermi en interaction attractive, on sait qu'il se produit également une transition superfluide si la température est suffisamment basse. Avant la célèbre théorie de Bardeen, Cooper et Schrieffer [23] expliquant la supraconductivité d'un gaz d'électron dans un métal, Schafroth, Blatt et Butler [24] avaient eu l'intuition que la transition superfluide était en réalité une condensation de Bose-Einstein (BEC) de paires de fermions fortement liés – les paires de Schafroth³. Dans le formalisme des opérateurs d'Ursell, cette idée se traduit naturellement par l'importance prise par les grands cycles d'échanges de paires de fermions liés par les interactions. En resommant la classe correspondante de diagrammes d'Ursell, nous avons tenté de calculer la température de transition d'un gaz dense de fermions en interaction attractive. Bien que ce travail n'ait pas abouti, nous présentons néanmoins les résultats obtenus et l'état actuel des calculs dans l'espoir qu'ils pourront aboutir bientôt à partir de ces résultats.

Le manuscrit est organisé de la manière suivante. Une première partie regroupe les travaux qui traitent des propriétés de transport dans les gaz froids : je commence par présenter la dérivation de l'équation cinétique pour un gaz froid polarisé de spin, avant de m'intéresser aux ondes de spin et à l'expérience du JILA, puis d'étudier l'instabilité de Castaing ; le dernier chapitre de cette partie traite des modes hydrodynamiques du gaz de Bose unidimensionnel à température nulle. La deuxième partie concerne les propriétés d'équilibre : je rappelle d'abord les théories classique et quantique du développement en agrégats dans un gaz dilué, avant de présenter l'extension aux systèmes denses classiques, puis quantiques. L'étude de la transition superfluide dans un gaz de Fermi attractif et le lien entre statistique des cycles d'échange et fraction condensée d'un condensat de Bose-Einstein sont exposés en annexe. L'essentiel de mon travail de thèse figure également dans les publications [26, 27, 28, 29, 30] reproduites à la fin de ce mémoire.

³L'histoire de la théorie de la supraconductivité est décrite dans le livre de Matricon et Waysand [25].

Première partie

Propriétés de transport des gaz froids

Dans cette première partie, nous étudions les propriétés de transport des gaz froids. Les trois premiers chapitres concernent les gaz froids non-dégénérés de bosons ou de fermions avec deux niveaux internes équivalents à un spin $1/2$. Nous commençons par détailler l'obtention d'une équation cinétique pour décrire le transport dans ces systèmes. Cette équation est ensuite utilisée pour étudier les ondes de spin de grande amplitude qui peuvent exister dans ces gaz. Puis nous discutons de l'instabilité de Castaing des ondes de spin transverse en présence d'un fort gradient spatial de spin longitudinal. Le quatrième chapitre concerne des systèmes différents : les gaz de Bose unidimensionnels à température nulle. Nous utilisons une approche hydrodynamique pour calculer les modes collectifs d'oscillation de ces gaz piégés.

Chapitre 1

Equation cinétique d'un gaz froid avec niveaux internes

La théorie cinétique des gaz a véritablement débuté lorsque Boltzmann a proposé l'équation intégral-différentielle qui décrit les gaz classiques dilués et porte son nom (voir Réf. [31], par exemple). Cette équation donne l'évolution temporelle de la densité dans l'espace de phase à *un* corps, en tenant compte uniquement de collisions binaires entre particules du gaz. Elle s'écrit comme l'équation d'évolution libre d'une particule dans l'espace de phase – identique à l'équation de Liouville à un corps – modifiée par un terme – appelé intégrale de collision de Boltzmann – qui tient compte des collisions binaires et fait intervenir la section efficace de collision.

Lorsque l'on veut décrire un gaz dilué et non-dégénéré en mécanique quantique, il suffit essentiellement de remplacer, dans l'équation de Boltzmann, la section efficace classique par la section efficace calculée par la théorie quantique des collisions à deux corps. A suffisamment basse température, lorsque le gaz est encore peu dégénéré mais que les collisions binaires se font à faible vitesse relative, l'effet des interactions ne se manifeste plus seulement dans une intégrale de collision locale : les termes d'évolution libre de la particule sont modifiés par le champ moyen non-local créé par les autres particules. Ce champ moyen est très faible dans un gaz dilué peu dégénéré, mais il peut devenir dominant dans un gaz dense et/ou dégénéré [32].

D'autres effets quantiques se manifestent lorsque les particules du gaz possèdent un degré de liberté interne, comme un spin $1/2$ par exemple. Si un tel gaz est polarisé, c'est-à-dire si le spin des différentes particules est en moyenne orienté dans la même direction, le transport est qualitativement modifié par rapport à celui d'un mélange classique de deux gaz (dont l'un correspondrait aux particules dont la projection du spin est $+1/2$ et l'autre aux particules dont la projection du spin est $-1/2$). Par exemple, la conduction de la chaleur diverge dans un gaz froid d' ^3He polarisé, noté $^3\text{He}\uparrow$, et le gaz peut présenter un mode oscillatoire inhabituel appelé ondes de spin transverse [33].

Ces dernières années, de nombreuses équipes expérimentales ont réussi à piéger magnétiquement et optiquement des gaz ultrafroids d'atomes alcalins [1]. Ces atomes possèdent de nombreux états internes tels que des états hyperfins, par exemple. Comme il est possible de manipuler ces états hyperfins avec des ondes radio-fréquences, on peut "isoler" deux des états internes et créer un système équivalent à un gaz d'atomes à deux niveaux. En considérant ces deux niveaux internes comme un pseudo-spin $1/2$, on est ramené à l'étude d'un gaz froid polarisé. C'est pour un tel système que nous voulons écrire une équation cinétique dans ce chapitre.

Nous commençons par décrire en détails un gaz froid dilué dont les particules (ou atomes) possèdent deux niveaux internes. Nous écrivons ensuite une équation cinétique pour ce système dans l'objectif d'étudier le transport de spin. L'équation cinétique est obtenue par trois méthodes différentes : l'ansatz d'Yvon-Snyder, l'ansatz de matrice S et l'approximation de champ moyen. Elles permettent de confirmer la validité de l'équation cinétique ainsi obtenue et de discuter de l'origine physique des différents termes qui la composent.

1.1 Gaz froid avec niveaux internes

Nous étudions un gaz d'atomes identiques, bosons ou fermions, avec deux niveaux internes. Nous assimilons, sans perte de généralité, ces deux niveaux internes aux niveaux d'un pseudo-spin $1/2$ appelé spin dans la suite. Le gaz est supposé non-dégénéré ($n\lambda_T^3 \ll 1$, où λ_T est la longueur d'onde thermique de de Broglie des particules et n la densité), ce qui fait que les propriétés d'équilibre sont décrites par la statistique de Boltzmann. Néanmoins, nous supposons que la température est suffisamment basse pour que les collisions se fassent à faible vitesse, i.e. dans le régime quantique, ce qui se traduit par $\lambda_T \gg a$ où a est la longueur de diffusion.

Pour décrire le transport dans ce système, nous allons écrire une équation cinétique. Dans le cas d'un système sans niveaux internes, le problème est bien connu et l'équation cinétique est celle de Boltzmann. Lorsque les atomes possèdent des niveaux internes, Lhuillier et Laloë (LL) ont proposé une équation cinétique qui généralise celle de Boltzmann [3]. L'équation cinétique LL, comme celle de Boltzmann, est locale, c'est-à-dire que les collisions sont supposées ponctuelles. En particulier, les termes de gradients spatiaux tels que le champ moyen de son zéro ne sont pas présents. Ils existent, par exemple, dans les équations cinétiques décrivant les liquides quantiques (voir l'équation cinétique de Landau pour un liquide de Fermi [34, 32]) ou les plasmas (voir l'équation cinétique de Vlasov pour un plasma sans collisions [35]). Dans la suite, nous dérivons une équation cinétique qui généralise celle de LL en incluant ces termes de champ moyen. Cette équation est d'abord obtenue en utilisant des méthodes collisionnelles proche de celle de Boltzmann. Les termes de champ moyen sont ensuite réobtenus, pour comparaison, par une méthode usuelle en théorie des champs.

1.2 Méthodes collisionnelles

En mécanique statistique classique, la méthode intuitive de Boltzmann pour obtenir une équation cinétique est basée sur l'étude des collisions individuelles. Elle consiste à ajouter l'effet de toutes les collisions binaires se produisant en chaque point de l'espace sur la distribution dans l'espace de phase à une particule $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Une autre méthode est celle consistant à fermer la hiérarchie exacte BBGKY par un ansatz reliant la distribution à deux particules f_2 à celle à une particule f_1 (voir Réfs. [36, 37] par exemple).

En mécanique quantique, on peut opérer de manière similaire. La distribution à une particule f_1 est remplacée par l'opérateur densité à un corps $\hat{\rho}_1$. Comme nous étudions des particules avec spin $1/2$, l'opérateur densité à un corps agit dans l'espace produit tensoriel de l'espace orbital et de l'espace de spin. L'équation cinétique opératorielle s'écrit de la façon suivante :

$$\frac{d\hat{\rho}_1}{dt} + (i\hbar)^{-1} [\hat{\rho}_1, \hat{H}_1]_- \simeq \left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}_1 \quad (1.1)$$

où

$$\hat{H}_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{1} + \hat{V}^{ext} \quad (1.2)$$

est le Hamiltonien à une particule, $\mathbf{p}$ l'impulsion de la particule, m sa masse, $\hat{1}$ l'opérateur unité dans l'espace de spin et $\hat{V}^{ext}$ l'opérateur potentiel d'interaction externe dû à un piège par exemple. Le membre de droite de cette équation décrit formellement l'effet des interactions entre atomes sur l'opérateur densité à un corps. Une telle équation ne peut être valable que pour un gaz dilué et sur des échelles de temps et d'espace beaucoup plus grandes que celles d'une collision. En l'absence de membre de droite, cette équation est équivalente à celle de Schrödinger pour un atome seul.

L'étape suivante consiste à introduire la transformée de Wigner [38, 39] $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ de $\hat{\rho}_1$ par rapport aux variables orbitales. Ceci permettra de traiter les variables orbitales de manière semi-classique, ce qui est justifié pour un gaz non-dégénéré, mais les variables internes de manière quantique. La définition de cette transformée de Wigner est :

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3\mathbf{r}' e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'/\hbar} \langle \mathbf{r} - \frac{\mathbf{r}'}{2} | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} + \frac{\mathbf{r}'}{2} \rangle \quad (1.3)$$

(c'est une fonction classique de la position et de l'impulsion, mais un opérateur de l'espace de spin, qu'on peut représenter par une matrice 2×2). On applique la transformation de Wigner à l'équation (1.1). Ceci implique de prendre la transformée de Wigner de produits d'opérateurs, ce que permet de faire la formule de Groenewold [40, 39]. Cette formule exprime la transformée de Wigner d'un produit d'opérateurs comme un développement infini en gradients. L'ordre zéro est simplement le produit des transformées de Wigner des opérateurs. Le premier ordre

fait apparaître un gradient par rapport à $\mathbf{r}$ et un gradient par rapport à $\mathbf{p}$. La transformée de Wigner du membre de gauche de l'équation (1.1) est alors :

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \hat{V}^{ext}(\mathbf{r})]_- \\ - \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot, \nabla_{\mathbf{r}} \hat{V}^{ext}(\mathbf{r})]_+ + \dots \end{aligned} \quad (1.4)$$

Les deux premiers termes (termes d'entraînement, "drift" en anglais) sont exacts, le commutateur apparaît à l'ordre zéro du développement en gradient alors que l'anticommutateur n'apparaît qu'à l'ordre un. Les ordres suivants sont symbolisés par les trois points. Les deux premiers termes, ainsi que l'anticommutateur qui est un terme de force, sont familiers dans le contexte de l'équation de Boltzmann. Le commutateur traduit la rotation dans l'espace interne dû à un champ magnétique effectif agissant sur les spins. Si nous voulons décrire un gaz piégé et donc garder le terme de force obtenu au premier ordre du développement en gradient, il est nécessaire d'obtenir la transformée de Wigner du membre de droite de l'équation (1.1) au même ordre du développement en gradients.

L'étape difficile dans la dérivation d'une équation cinétique est celle consistant à donner une forme précise au membre de droite de l'équation (1.1). Il existe dans la littérature de nombreuses propositions pour le faire. Dans la suite, nous proposons un ansatz inspiré du travail de Lhuillier et Laloë [3] et basé sur le formalisme de la matrice S de collision. Si naturel qu'il soit, il ne semble pas avoir été discuté dans ce contexte. Dans l'objectif de pouvoir comparer nos résultats avec ceux d'une méthode connue, nous présentons également l'approche de Yvon-Snyder [41, 42].

1.2.1 Interactions indépendantes du spin

Dans un premier temps, nous considérons des interactions entre particules indépendantes du spin. De plus, les collisions sont supposées élastiques. Pour chaque canal de collision, à très basse température, les collisions se produisent dans le régime quantique. Elles sont alors décrites par un seul paramètre : la longueur de diffusion en onde s notée a . Le régime quantique de collision est atteint lorsque $\lambda_T \gg a$, ce que nous supposons désormais. Les collisions en onde s sont isotropes et la matrice T (nous suivons la définition habituelle, voir Roman [43] par exemple) s'écrit

$$T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = T_k(\hat{k}, \hat{k}') = -\frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} f_k(\theta) = \frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} (a - ika^2 + \dots) \quad (1.5)$$

où m est la masse des particules, $f_k(\theta)$ l'amplitude de diffusion (qui pour la diffusion en onde s est indépendante de l'angle polaire θ) et k le vecteur d'onde de collision. Les termes d'ordre a^2 doivent être gardés pour pouvoir satisfaire l'unitarité de la matrice S de collision (théorème optique). On remarque qu'un gaz non-dégénéré $n\lambda_T^3 \ll 1$ et froid, i.e. dans le régime de collision quantique $a \ll \lambda_T$, est nécessairement dilué $na^3 \ll 1$. Ce qui signifie que le gaz est faiblement interagissant.

Ansatz de Yvon-Snider

La méthode proposée par Yvon [41], puis indépendamment par Snider [42], repose sur la hiérarchie BBGKY quantique [36] tronquée par une méthode collisionnelle. Celle-ci est obtenue à partir de l'équation de Liouville-von Neumann (voir Réf. [44] par exemple) sur l'opérateur densité à N -corps en opérant des traces partielles successives. La première équation de la hiérarchie relie l'opérateur densité à un corps $\hat{\rho}_1$ à l'opérateur densité à deux corps $\hat{\rho}_2$. La deuxième relie l'opérateur densité à deux corps $\hat{\rho}_2$ à l'opérateur densité à trois corps $\hat{\rho}_3$. Et ainsi de suite. Les premières équations de la hiérarchie sont

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_1}{dt} + [\hat{\rho}_1, \hat{H}_1] = Tr_2 \left\{ \left[\hat{V}(1, 2), \hat{\rho}_2(1, 2) \right] \right\} \quad (1.6)$$

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_2}{dt} + [\hat{\rho}_2, \hat{H}_2] = Tr_3 \left\{ \left[\hat{V}(1, 3) + \hat{V}(2, 3), \hat{\rho}_3(1, 2, 3) \right] \right\} \quad (1.7)$$

...

où $\hat{V}$ est le potentiel d'interaction entre atomes. La notation Tr_2 signifie que l'on doit prendre la trace sur tout l'espace, orbital et de spin, de la particule 2. La méthode de Yvon-Snider consiste à négliger le terme d'interaction (membre de droite) dans (1.7). On résout ensuite cette équation tronquée en supposant que les collisions binaires sont suffisamment séparées les unes des autres (dans un gaz dilué) pour pouvoir utiliser le formalisme de la théorie des collisions à 2 corps. On suppose également que les partenaires de collision ne sont pas corrélés avant collision (équivalent du Stosszahlansatz de Boltzmann). Ceci permet d'introduire l'opérateur de collision de Møller $\hat{\Omega} \equiv \hat{\Omega}^{(+)}$ qui transforme les ondes planes en états stationnaires de diffusion entrants (voir Réf. [43] par exemple). L'opérateur densité à deux corps s'écrit alors :

$$\hat{\rho}_2(1, 2) \simeq \hat{\Omega} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{\Omega}^\dagger \quad (1.8)$$

On insère cette expression dans la première équation de la hiérarchie (1.6) et on obtient

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_1}{dt} + [\hat{\rho}_1, \hat{H}_1] \simeq Tr_2 \left\{ \left[\hat{V}(1, 2), \hat{\Omega} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{\Omega}^\dagger \right] \right\} \quad (1.9)$$

qui est de la forme de l'équation (1.1). Cette équation est valable pour un gaz dilué de particules distinguables. Pour un gaz non-dégénéré de bosons ou fermions, elle se généralise en :

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}_1(1) = (i\hbar)^{-1} Tr_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \left[\hat{V}(1, 2), \hat{\Omega} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{\Omega}^\dagger \right] \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} \quad (1.10)$$

où $\hat{P}_{ex.}$ est l'opérateur d'échange des particules 1 et 2, et où :

$$\epsilon = 1 \text{ pour des bosons, } \epsilon = -1 \text{ pour des fermions} \quad (1.11)$$

On peut alors appliquer la transformée de Wigner à ces expressions pour aboutir à une équation cinétique fermée sur $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Par exemple, en développant l'équation (1.9) à l'ordre zéro de la formule de Groenewold, on obtient l'expression bien connue de l'intégrale de collision de Boltzmann :

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = - \int d^3q \frac{q}{m} \left(\sigma_T(k) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) - \int d^2\hat{k}' \sigma_k(\hat{k}, \hat{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2) \right) \quad (1.12)$$

où $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ est la trace sur l'espace de spin de $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \text{Tr}_S \{ \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \} \quad (1.13)$$

et où $\hat{k}$ est le vecteur unité dans la direction de $\mathbf{k}$ et θ est l'angle entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$. Nous utilisons les notations habituelles de la théorie de Boltzmann :

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= 2\hbar\mathbf{k} & \mathbf{p}_2 &= \mathbf{p}_1 - \mathbf{q} \\ \mathbf{p}'_1 &= \mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2} + \hbar k \hat{k}' & \mathbf{p}'_2 &= \mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2} - \hbar k \hat{k}' \end{aligned} \quad (1.14)$$

ainsi que la définition des sections efficaces différentielles et totales :

$$\sigma_k(\hat{k}, \hat{k}') = \frac{4\pi^4 m^2}{\hbar^4} |T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2; \quad \sigma_T(k) = \int d^2\hat{k}' \sigma_k(\hat{k}, \hat{k}') \quad (1.15)$$

Les termes suivants du développement en gradients font apparaître des termes de type champ moyen que nous n'écrivons pas ici. Ils peuvent être trouvés dans l'appendice de la Réf. [47].

Si nous incluons le spin et la statistique, nous devons utiliser l'équation (1.10) à la place de (1.9). A l'ordre zéro du développement en gradients, nous obtenons des termes d'échange qui s'ajoutent au membre de droite de (1.12) :

$$\begin{aligned} & -\frac{\epsilon}{2} \int d^3q \frac{q}{m} \left\{ i\tau_{fwd.}^{ex.}(k) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_- \right. \\ & \quad \left. - \int d^2\hat{k}' i\tau_k^{ex.}(\theta) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2)]_- + \right. \\ & \quad \left. + \int d^2\hat{k}' \sigma_k^{ex.}(\theta) ([\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_+ - [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2)]_+) \right\} \end{aligned} \quad (1.16)$$

où les sections efficaces généralisées sont définies par :

$$\tau_{fwd.}^{ex.}(k) = -\frac{8\pi^3 m}{\hbar^2 k} \text{Re} \{ T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) \} \quad (1.17)$$

et

$$\sigma_k^{ex.}(\theta) - i\tau_k^{ex.}(\theta) = \frac{4\pi^4 m^2}{\hbar^4} T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* \quad (1.18)$$

Dans l'équation (1.16), les deux termes dans les deux premières lignes correspondent respectivement à l'effet de rotation des spins identiques (ISRE) vers l'avant et à l'ISRE latéral¹; les deux termes dans la troisième ligne correspondent à des effets d'échange qui modifient la valeur des sections efficaces totales et différentielles. Pour des précisions sur ce dernier point voir [3]. Plus de détails sur la limite de validité de l'équation de Yvon-Snider et sur les différents termes qu'elle contient peuvent être trouvés dans [45], [46] ou [47] (en particulier l'appendice de cette dernière référence). Nous n'écrivons pas ici les termes qui apparaissent au premier ordre du développement en gradients car ils seront explicitement écrit dans le paragraphe suivant, dans la limite de basse énergie.

Ansatz de matrice S

Un autre point de vue, plus proche de la méthode originale de Boltzmann, est celui pris par Lhuillier et Laloë [3]. Il repose sur l'emploi de la matrice S de collision. Comme les collisions sont traitées comme des "processus fermés" (on ignore les particules "au milieu d'une collision"), il est possible d'utiliser la matrice S pour relier exactement les opérateurs densité à un corps avant collision à ceux après collision. On peut généraliser l'idée originale de LL qui concerne les opérateurs densité à un corps dans *l'espace de spin* aux opérateurs densité à un corps dans *tout l'espace à une particule* (orbite et spin). On obtient l'expression suivante pour l'opérateur densité à un corps après collision $\hat{\rho}'_1$ en fonction du même opérateur avant collision :

$$\hat{\rho}'_1(1) = Tr_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \hat{S} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{S}^\dagger \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} \quad (1.19)$$

où la matrice S est reliée à la matrice T par :

$$\begin{aligned} \langle 1 : \mathbf{k}_f; 2 : -\mathbf{k}_f \mid \hat{S} \mid 1 : \mathbf{k}_i; 2 : -\mathbf{k}_i \rangle &= \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) \\ &- i \frac{\pi}{\hbar^2 k_i} \delta(k_f - k_i) T(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \end{aligned} \quad (1.20)$$

On écrit alors que la variation de $\hat{\rho}_1$ durant un court intervalle de temps Δt (plus grand que la durée de collision) est donnée par :

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}_1(1) \times \Delta t \simeq Tr_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \left[\hat{S} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{S}^\dagger - \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \right] \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} \quad (1.21)$$

Nous verrons que Δt disparaît naturellement du calcul grâce à la présence d'un carré de fonction delta de l'énergie. L'intervalle de temps Δt est restreint à :

$$\frac{a}{v_T} \ll \Delta t \ll \tau \quad (1.22)$$

¹L'ISRE est discuté dans le prochain chapitre.

car il doit être plus grand que la durée de collision, dont l'ordre de grandeur est donné par a/v_T où $v_T \equiv \sqrt{k_B T/m}$ est la vitesse thermique des atomes, et plus petit que le temps moyen entre collisions τ , pour que l'équation cinétique ait un sens. On remarque que l'ansatz de matrice S (1.21) n'est valable que pour un gaz non-dégénéré dans lequel :

$$Tr_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} = \hat{\rho}_1(1) + \epsilon \hat{\rho}_1(1)^2 \simeq \hat{\rho}_1(1) \quad (1.23)$$

Comme dans le cas de l'ansatz d'Yvon-Snyder, l'équation cinétique est obtenue en prenant la transformée de Wigner de l'équation opératorielle puis en développant en gradients. Ce calcul est détaillé dans l'appendice 1.5. On se contente ici de donner le résultat. L'équation cinétique est :

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) + \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{V}^{ext}(\mathbf{r}_1) + \epsilon g \hat{n}(\mathbf{r}_1) \right]_- \\ - \frac{1}{2} \left[\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\hat{V}^{ext}(\mathbf{r}_1) + g n(\mathbf{r}_1) \hat{1} + \epsilon g \hat{n}(\mathbf{r}_1)) \right]_+ = I_{coll}[\hat{\rho}] \end{aligned} \quad (1.24)$$

où $g \equiv 4\pi\hbar^2 a/m$ et $\hat{n}(\mathbf{r}_1)$ est défini par :

$$\hat{n}(\mathbf{r}) \equiv \int d^3p \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (1.25)$$

Dans cette équation, comme c'est l'usage, les termes proportionnels à la constante de couplage g ont été écrits dans le membre de gauche. Le champ moyen contenu dans le commutateur est appelé champ moyen de spin, celui dans l'anticommutateur champ moyen de son zéro. L'intégrale de collision I_{coll} regroupe les termes proportionnels au carré de la constante de couplage. Elle est donnée par :

$$\begin{aligned} I_{coll}[\hat{\rho}] = - \int d^3q \frac{q}{m} \int d^2\hat{k}' a^2 \left(\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) - \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2) \right. \\ \left. + \frac{\epsilon}{2} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_+ - \frac{\epsilon}{2} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2)]_+ \right) \end{aligned} \quad (1.26)$$

où $\mathbf{p}_2$, $\mathbf{p}'_1$ et $\mathbf{p}'_2$ sont définis dans l'équation (1.14). Si on néglige l'anticommutateur obtenu au premier ordre du développement en gradients dans le membre de gauche de (1.24), on retrouve l'équation cinétique LL [3] dans la limite de basse énergie. Nous insistons sur le fait que l'équation cinétique est obtenue comme résultat de deux développements simultanés : un développement en gradients dont le petit paramètre est $\hbar/\delta x$ δp , où δx (respectivement δp) est le gradient typique dans l'espace position (resp. impulsion) de la distribution dans l'espace de phase ; et un développement en interaction dont le petit paramètre est a/λ_T .

1.2.2 Interactions dépendantes du spin

Jusqu'à présent, nous avons supposé que l'interaction entre atomes contenue dans le Hamiltonien ne dépend pas du spin. Nous levons ici cette hypothèse. Dans la limite de basse énergie, il suffit de considérer quatre longueurs de diffusion : a_{11} , a_{22} , $a_{12}^{(d)}$ et $a_{12}^{(t)}$. Les deux premières décrivent des processus de collision entre atomes dans le même état interne. La troisième décrit un processus de collision *direct* entre atomes dans des états internes différents. La quatrième décrit un processus de collision de *transfert* entre atomes dans des états internes différents. Les atomes numérotés² échangent leur état interne au cours d'une collision de transfert, alors qu'ils conservent leur état interne au cours d'une collision directe. Ces deux derniers processus sont bien connus dans la théorie des collisions d'échange de spin [48]. La matrice T est une matrice 4×4 dans l'espace de spin ; à l'ordre le plus bas des longueurs de diffusion elle est donnée par :

$$\langle 1 : \alpha ; 2 : \beta | \hat{T}_k | 1 : \gamma ; 2 : \delta \rangle = \frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11}(k) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{a}_{22}(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{a}_{12}^{(d)}(k) & \tilde{a}_{12}^{(t)}(k) \\ 0 & 0 & \tilde{a}_{12}^{(t)}(k) & \tilde{a}_{12}^{(d)}(k) \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

où α, β, γ et $\delta \in \{1, 2\}$ sont les indices de spin et où :

$$\tilde{a}_{\alpha\beta}(k) = a_{\alpha\beta} [1 - ik a_{\alpha\beta}] \quad (1.28)$$

L'équation (1.27) remplace (1.5) quand les interactions dépendent du spin.

Equation cinétique

A partir d'ici, la dérivation de l'équation cinétique se fait de manière très similaire au cas où les interactions inter-atomiques sont indépendantes du spin (voir l'appendice 1.5), en utilisant la matrice T précédente à la place de (1.5). Le calcul n'est pas plus difficile mais est beaucoup plus long en raison de la présence des indices de spin. Si nous ne sommes intéressé que par les termes de champ moyen, nous pouvons faire un calcul opératoire plus rapide en ne gardant que les termes de diffusion vers l'avant de l'ansatz de matrice S . Nous détaillons maintenant ce calcul.

La matrice T précédente peut se réécrire, à l'ordre le plus bas en longueur de diffusion, avec des indices de spin :

$$\langle \alpha ; \beta | \hat{T}_k | \gamma ; \delta \rangle = \delta_{\alpha,\gamma} \delta_{\beta,\delta} \frac{g_{\alpha\beta}^{(d)}}{(2\pi)^3} + (1 - \delta_{\alpha,\beta}) \delta_{\alpha,\delta} \delta_{\beta,\gamma} \frac{g_{\alpha\beta}^{(t)}}{(2\pi)^3} \quad (1.29)$$

où $g_{\alpha\alpha}^{(d)} = 4\pi\hbar^2 a_{\alpha\alpha}/m$ et $g_{12}^{(d,t)} = 4\pi\hbar^2 a_{12}^{(d,t)}/m$. A l'ordre le plus bas en longueurs de diffusion, les éléments de matrice T sont réels. Comme nous ne voulons obtenir que

²On utilise la première quantification.

les termes de champ moyen, nous ne gardons que les termes linéaires en matrice T dans l'ansatz de matrice S . Le membre de gauche de l'équation (1.21) s'écrit alors

$$\frac{2\pi}{i\Delta t} T r_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \left[\hat{\mathcal{T}} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) - \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{\mathcal{T}} \right] \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} \quad (1.30)$$

où nous avons introduit la matrice $\mathcal{T}$ appelée matrice T sur couche de masse ("on-shell T matrix" en anglais). Elle est définie par :

$$\hat{S} = \hat{1} - i2\pi \hat{\mathcal{T}} \quad (1.31)$$

En utilisant les propriétés de la trace partielle et le fait que l'opérateur d'échange $\hat{P}_{ex.}$ commute avec la matrice $\mathcal{T}$, nous pouvons réécrire l'équation précédente sous la forme d'un commutateur :

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{2\pi\hbar}{\Delta t} T r_2 \left\{ (\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}) \hat{\mathcal{T}} \hat{\rho}_1(2) \right\}, \hat{\rho}_1(1) \right]_- \quad (1.32)$$

Nous voyons que le premier opérateur dans le commutateur pourrait jouer le rôle d'un Hamiltonien effectif à une particule. Dans la suite, nous montrons dans quel sens c'est effectivement le cas.

Nous considérons à présent un élément de matrice quelconque du commutateur (1.32). Pour simplifier les équations, nous n'écrivons que le premier terme de l'élément de matrice du commutateur :

$$\langle 1 : \mathbf{p}_1, \alpha | \frac{2\pi\hbar}{\Delta t} T r_2 \left\{ (\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}) \hat{\mathcal{T}} \hat{\rho}_1(2) \right\} \hat{\rho}_1(1) | 1 : \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \quad (1.33)$$

Nous calculons cet élément de matrice en introduisant trois relations de fermeture de la forme

$$\hat{1} = \int d^3p \sum_{\beta} |\mathbf{p}, \beta\rangle \langle \mathbf{p}, \beta| \quad (1.34)$$

et en utilisant l'expression (1.29) de la matrice T . Nous obtenons

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi\hbar}{(2\pi)^3 \Delta t} \times \int d^3p_2 \int d^3p_3 \delta(E_{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2} - E_{(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)/2}) \\ & \times \sum_{\beta} \left\{ g_{\alpha\beta}^{(d)} \langle \mathbf{p}_3, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \langle \mathbf{p}_4, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \right. \\ & + (1 - \delta_{\alpha,\beta}) g_{\alpha\beta}^{(t)} \langle \mathbf{p}_3, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \langle \mathbf{p}_4, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \\ & + \epsilon g_{\alpha\beta}^{(d)} \langle \mathbf{p}_3, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \langle \mathbf{p}_4, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \\ & \left. + \epsilon (1 - \delta_{\alpha,\beta}) g_{\alpha\beta}^{(t)} \langle \mathbf{p}_3, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \langle \mathbf{p}_4, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \right\} \quad (1.35) \end{aligned}$$

où $\mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3$. En définissant les trois constantes de couplage suivantes

$$g_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta}^{(d)} + \epsilon(1 - \delta_{\alpha,\beta})g_{\alpha,\beta}^{(t)} \quad (1.36)$$

(avec $g_{21} = g_{12}$) nous pouvons réécrire l'équation (1.35) comme suit :

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi\hbar}{\Delta t} \times \int d^3p_2 \int d^3p_3 \delta(E_{(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2)/2} - E_{(\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)/2}) \\ & \times \sum_{\beta} \frac{g_{\alpha\beta}}{(2\pi)^3} \left\{ \langle \mathbf{p}_4, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \langle \mathbf{p}_3, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \right. \\ & \left. + \epsilon \langle \mathbf{p}_4, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \langle \mathbf{p}_3, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \right\} \end{aligned} \quad (1.37)$$

Nous constatons donc que pour une statistique donnée de particules (bosons ou fermions), seules trois constantes de couplage g_{11} , g_{22} et g_{12} jouent un rôle.

Dans l'appendice 1.5, nous montrons qu'en prenant la transformée de Wigner de l'équation cinétique opératorielle puis en développant en gradients, des carrés de fonction delta de l'énergie apparaissent. Ils sont remplacés par

$$[\delta(E_k)]^2 = \frac{\Delta t}{2\pi\hbar} \delta(E_k) \quad (1.38)$$

où Δt est une durée supérieure à celle d'une collision. L'équation précédente est bien connue en théorie formelle des collisions [43]. Elle permet de traiter le carré d'une fonction delta de l'énergie et de faire apparaître l'intervalle de temps Δt qui va se simplifier avec celui introduit dans la définition de l'ansatz de matrice S , équation (1.21). Ici, nous ne pouvons utiliser cette simplification dans l'équation (1.37), car il n'y a qu'une seule fonction delta. L'idée est alors de prendre la transformée de Wigner de l'opérateur (1.32) et de réaliser un développement en gradients. A chaque ordre du développement, une deuxième fonction de conservation de l'énergie $\delta(E_k)$ identique à la première apparaît. Nous pouvons ensuite utiliser la simplification à chaque ordre du développement en gradients (le calcul est fait pour les deux premiers ordres, dans le cas des interactions indépendantes du spin, dans l'appendice 1.5). Formellement donc, la quantité

$$\frac{2\pi\hbar}{\Delta t} \delta(E_{(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2)/2} - E_{(\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)/2}) \quad (1.39)$$

dans l'équation (1.37) est remplacée par 1, i.e. à chaque ordre du développement en gradients mais pas nécessairement pour la série resommée. L'élément de matrice (1.33) devient

$$\begin{aligned} & \int d^3p_2 \int d^3p_3 \sum_{\beta} \frac{g_{\alpha\beta}}{(2\pi)^3} \times \left\{ \langle \mathbf{p}_4, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \langle \mathbf{p}_3, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \right. \\ & \left. + \epsilon \langle \mathbf{p}_4, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \langle \mathbf{p}_3, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \right\} \end{aligned} \quad (1.40)$$

Ce résultat peut s'écrire

$$\langle 1 : \mathbf{p}_1, \alpha | \hat{V}^{mf}(1) \hat{\rho}_1(1) | 1 : \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \quad (1.41)$$

où

$$V_{\alpha\beta}^{mf}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma=1,2} g_{\alpha\gamma} \langle \mathbf{r}, \gamma | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r}, \gamma \rangle + \epsilon g_{\alpha\beta} \langle \mathbf{r}, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r}, \beta \rangle \quad (1.42)$$

est le potentiel de champ moyen. Ainsi, l'équation (1.32) peut formellement s'écrire :

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{V}^{mf}(1), \hat{\rho}_1(1) \right]_- \quad (1.43)$$

Cette équation est valable lorsqu'elle est utilisée pour calculer sa transformée de Wigner puis développer en gradients.

Nous pouvons donc réécrire l'équation cinétique opératorielle (1.1) sous la forme :

$$\frac{d\hat{\rho}_1}{dt} + (i\hbar)^{-1} \left[\hat{\rho}_1, \hat{H}_1 + \hat{V}^{mf} \right]_- = 0 \quad (1.44)$$

Nous définissons le potentiel effectif à une particule $\hat{U}$ comme la somme du potentiel extérieur $\hat{V}^{ext}$ et du potentiel de champ moyen $\hat{V}^{mf}$, c'est-à-dire :

$$\hat{U} = \hat{V}^{ext} + \begin{pmatrix} (1 + \epsilon)g_{22}n_2 + g_{12}n_1 & \epsilon g_{12}n_{21} \\ \epsilon g_{12}n_{12} & (1 + \epsilon)g_{11}n_1 + g_{12}n_2 \end{pmatrix} \quad (1.45)$$

Nous obtenons ensuite l'équation cinétique en prenant la transformée de Wigner et en développant en gradients jusqu'au premier ordre inclus. Le résultat est similaire à l'équation (1.4) avec le potentiel extérieur $\hat{V}^{ext}$ remplacé par le potentiel effectif $\hat{U}$:

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \hat{U}(\mathbf{r})]_- \\ - \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{U}(\mathbf{r})]_+ = 0 \end{aligned} \quad (1.46)$$

Si nous suivons la procédure détaillée dans l'appendice 1.5, nous retrouvons les mêmes termes de champ moyen et nous obtenons en plus l'intégrale de collision. L'équation cinétique s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \hat{U}(\mathbf{r})]_- \\ - \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{U}(\mathbf{r})]_+ = I_{coll}[\hat{\rho}] \end{aligned} \quad (1.47)$$

Cette équation ressemble à celle de Landau-Silin [49, 34] pour un liquide de Fermi normal dans un champ magnétique. Le deuxième terme du membre de gauche est le terme de dérive habituel ; l'anticommutateur est un terme de force incluant l'effet d'un potentiel extérieur et du champ moyen ; le commutateur est un terme de précession de spin (précession de Larmor) autour d'un champ magnétique effectif dont l'origine est en partie externe (effet Zeeman différentiel) et en partie interne (champ moyen de spin).

Evolution de la densité et de la densité de spin dans l'espace de phase

La structure de l'équation cinétique précédente est plus explicite lorsque celle-ci est écrite en termes de densité de particules et de densité de spin. La fonction de distribution $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ et le potentiel effectif $\hat{U}(\mathbf{r})$ sont des matrices 2×2 dans l'espace de spin. Nous les décomposons sur la base formée par les matrices de Pauli $\hat{\sigma}$ et la matrice unité $\hat{1}$:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= \frac{1}{2} (f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)\hat{1} + \mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \hat{\sigma}) \\ \hat{U}(\mathbf{r}, t) &= U_0(\mathbf{r}, t)\hat{1} + \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\sigma}\end{aligned}\quad (1.48)$$

Lorsqu'on l'écrit en fonction de la densité dans l'espace de phase f et de la densité de spin dans l'espace de phase $\mathbf{M}$, l'équation (1.47) devient :

$$\begin{aligned}\partial_t f + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} &= I_{coll}^{(f)}[f, \mathbf{M}] \\ \partial_t \mathbf{M} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \frac{2\mathbf{U}}{\hbar} \times \mathbf{M} &= I_{coll}^{(M)}[f, \mathbf{M}]\end{aligned}\quad (1.49)$$

On voit sur ces équations que U_0 joue le rôle d'un potentiel de piégeage global et $\mathbf{U}$ celui d'un champ magnétique effectif local autour duquel les spins précessent. Le potentiel de piégeage effectif U_0 est donné par :

$$\begin{aligned}U_0(\mathbf{r}, t) &= \frac{V_2^{ext} + V_1^{ext}}{2} + \left[\frac{1+\epsilon}{2}(g_{22} + g_{11}) + g_{12} \right] \frac{n}{2} \\ &+ \frac{1+\epsilon}{2}(g_{22} - g_{11}) \frac{m_{\parallel}}{2}\end{aligned}\quad (1.50)$$

et le champ magnétique effectif est :

$$\begin{aligned}\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar\Omega(x, t)}{2} \mathbf{e}_{\parallel} + \epsilon \frac{g_{12}\mathbf{m}(x, t)}{2} \\ \hbar\Omega(\mathbf{r}, t) &= V_2^{ext} - V_1^{ext} + \frac{1+\epsilon}{2} [(g_{22} - g_{11})n + (g_{22} + g_{11} - 2g_{12})m_{\parallel}]\end{aligned}\quad (1.51)$$

où la densité locale et la polarisation locale de spin sont définies comme suit :

$$\begin{aligned}n &= n_2 + n_1 ; m_{\parallel} = n_2 - n_1 \\ m_{\perp,1} &= n_{21} + n_{12} ; m_{\perp,2} = i(n_{21} - n_{12})\end{aligned}\quad (1.52)$$

La base orthonormée dans l'espace de spin est notée $\{\mathbf{e}_{\perp,1} ; \mathbf{e}_{\perp,2} ; \mathbf{e}_{\parallel}\}$. Les deux premiers vecteurs définissent le plan transverse, le troisième la direction longitudinale.

L'intégrale de collision dans l'équation (1.47), c'est-à-dire l'équivalent de (1.26) lorsque les interactions dépendent du spin, n'est pas écrite explicitement. Son expression est complexe et lorsque nous discuterons des ondes de spin, nous n'aurons

pas besoin de sa forme exacte ³. A la place, nous utiliserons une expression simple en termes d'un seul temps de relaxation. L'approximation du temps de relaxation s'écrit

$$I_{coll}^{(f)} \simeq -\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\tau}; \quad I_{coll}^{(M)} \simeq -\frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \mathbf{M}^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\tau} \quad (1.53)$$

où f^{eq} (resp. $\mathbf{M}^{eq}$) est la densité (de spin) dans l'espace de phase, et τ est un temps de relaxation. On devrait normalement utiliser un temps de relaxation différent pour l'équation sur f , celle sur $\mathbf{M}_{\parallel}$ et celle sur $\mathbf{M}_{\perp}$. Cependant dans un gaz polarisé non-dégénéré, on sait que ces temps de relaxation sont égaux (voir les travaux de Meyerovich et collaborateurs [51] et ceux de Mullin⁴ et collaborateurs [53]). De plus, dans le prochain chapitre, quand nous étudierons le transport de spin, nous aurons comme exemple l'expérience réalisée au JILA [2, 54] sur le ⁸⁷Rb. Pour cet atome, les trois longueurs de diffusion a_{11} , a_{22} et a_{12} sont du même ordre de grandeur $\sim a_{12} = 98.2a_0$, où a_0 est le rayon de Bohr [2]. Nous n'avons donc besoin que d'un seul temps de relaxation, dont l'ordre de grandeur est donné par :

$$\tau \sim \frac{1}{4\pi a_{12}^2 n v_T} \quad (1.54)$$

qui est le temps moyen entre collisions dans un gaz de Boltzmann de densité n , à la température T , dans lequel les collisions se produisent en onde s avec une section efficace $\sigma \simeq 4\pi a_{12}^2$. Bien que cela ne soit pas nécessaire, on peut facilement obtenir une meilleur valeur du temps de relaxation (pour un système homogène) à partir du calcul du coefficient de diffusion de spin fait par LL [7] et exposé dans le livre de Smith et Jensen [56]. Le résultat est :

$$\tau = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{1}{4\pi a_{12}^2 n v_T} \quad (1.55)$$

Finalement, l'équation cinétique que nous utiliserons pour discuter du transport de spin dans les chapitres suivants est

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} &\simeq -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \\ \partial_t \mathbf{M} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \frac{2\mathbf{U}}{\hbar} \times \mathbf{M} &\simeq -\frac{\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq}}{\tau} \end{aligned} \quad (1.56)$$

Nous concluons cette partie en mettant en avant les différences entre cette équation cinétique et celle de LL [3]. L'équation (1.56) contient tout le champ

³L'intégrale de collision (locale) dans la limite de basse énergie et pour des interactions dépendantes du spin est obtenue dans [50].

⁴Très récemment, Mullin a montré que même dans le cas d'un gaz non-dégénéré mais avec des interactions dépendantes du spin, les temps de relaxation transverses et longitudinaux peuvent être différents [52]. Dans le cas du gaz de ⁸⁷Rb, la différence est de l'ordre de 0.2%.

moyen, c'est-à-dire le champ moyen de spin, également contenu dans l'équation LL, et le champ moyen de son zéro. Elle est obtenue pour des interactions dépendantes du spin alors que l'équation LL concerne des interactions indépendantes du spin. Elle est cependant moins générale que l'équation LL par certains aspects : les collisions sont supposées se produire à basse énergie et l'intégrale de collision est traitée par une approximation de temps de relaxation. Ces deux restrictions sont facilement levées mais ceci n'est pas nécessaire pour la discussion du transport de spin des prochains chapitres.

1.3 Approximation du champ moyen

Dans ce paragraphe nous réobtenons les termes de champ moyen (c'est-à-dire le potentiel $\hat{V}^{mf}$) par l'approximation usuelle du champ moyen en théorie des champs. Le système est décrit par la densité de Hamiltonien suivante :

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_{int} \\ &= \sum_{\alpha=1,2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) + V_{\alpha}^{ext}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha\beta} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r})\end{aligned}\tag{1.57}$$

Les opérateurs de champs d'annihilation et de création d'une particule dans l'état interne α sont $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$, $\psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r})$. Ils obéissent aux relations usuelles de commutation (ou d'anticommutation) à temps égaux pour des bosons (ou des fermions). Les interactions dépendent des trois constantes de couplage $g_{\alpha\beta} = 4\pi\hbar^2 a_{\alpha\beta}/m$. Il s'agit donc d'un Hamiltonien effectif avec un potentiel d'interaction modèle valable à basse énergie. C'est une approche usuelle dans l'étude des gaz froids : les éléments de matrice du vrai potentiel sont remplacés par les éléments de matrice T à basse énergie. Voir par exemple la méthode du pseudo-potentiel de Fermi [44] ou la procédure de renormalisation $V \rightarrow T$ [55].

Nous cherchons à obtenir l'évolution temporelle de la matrice densité à un corps $\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) \rangle$, où $\langle \dots \rangle$ est la moyenne par rapport à l'opérateur densité à N -corps du système. A cette fin, nous écrivons l'équation du mouvement de Heisenberg pour $\psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \psi_{\beta}(\mathbf{r}, t)$ en utilisant l'Hamiltonien (1.57) puis nous prenons la valeur moyenne $\langle \dots \rangle$. La partie libre $\mathcal{H}_1$ (énergie cinétique et potentiel extérieur) de la densité de Hamiltonien donne l'équation de Liouville-von Neumann :

$$\begin{aligned}i\hbar\partial_t\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \nabla_{\mathbf{r}'}^2) \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \\ &\quad + (V_{\alpha}^{ext}(\mathbf{r}) - V_{\beta}^{ext}(\mathbf{r}')) \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t).\end{aligned}\tag{1.58}$$

La densité d'Hamiltonien d'interaction $\mathcal{H}_{int}$ couple la matrice densité à un corps à la valeur moyenne du produit de quatre opérateurs de champs (matrice densité à deux corps) :

$$\sum_{\gamma} g_{\gamma\alpha} \langle \psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r}') \rangle - \sum_{\gamma} g_{\gamma\alpha} \langle \psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\gamma}(\mathbf{r}') \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r}') \rangle \quad (1.59)$$

Si on ne s'intéresse qu'à la dynamique sur des échelles de temps grandes devant la durée d'une collision, on peut négliger certaines corrélations et remplacer l'opérateur densité à N -corps exact par sa description réduite sous la forme d'un opérateur densité à N -corps Gaussien [57]. La valeur moyenne du produit de quatre opérateurs de champs peut alors être calculée par le théorème de Wick. On note que si le gaz était condensé de Bose, on ne pourrait utiliser ce théorème pour calculer la valeur moyenne. En inversant le point de vue, la procédure qui consiste à remplacer la moyenne d'un produit par le produit de la moyenne et à négliger les fluctuations peut être vue comme la définition de l'approximation du champ moyen. Dans le contexte des équations du mouvement de la matrice densité à un corps, elle s'appelle approximation de phase aléatoire ("random phase approximation" (RPA) en anglais) [56]. L'équation (1.59) devient :

$$\sum_{\delta=1,2} V_{\alpha\delta}^{mf}(\mathbf{r}, t) \rho_{\delta\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) - \sum_{\delta=1,2} \rho_{\alpha\delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) V_{\delta\beta}^{mf}(\mathbf{r}', t). \quad (1.60)$$

où le potentiel de champ moyen (matrice 2×2) est :

$$V_{\alpha\beta}^{mf}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma=1,2} g_{\alpha\gamma} \langle \psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}) \rangle + \epsilon g_{\alpha\beta} \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r}) \rangle \quad (1.61)$$

Le premier terme de l'équation précédente est le champ moyen direct, le deuxième est le champ moyen d'échange proportionnel à ϵ . Le potentiel effectif à une particule $\hat{U}(\mathbf{r})$ est la somme du potentiel extérieur $\hat{V}^{ext}(\mathbf{r})$ et du potentiel de champ moyen $\hat{V}^{mf}(\mathbf{r})$. Pour faire le lien avec les résultats des paragraphes précédents, on remarque que $n_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \rangle$ est la densité moyenne d'atomes dans l'état interne $\alpha = 1, 2$ et que les éléments non-diagonaux $n_{12}(\mathbf{r}, t) = n_{21}^*(\mathbf{r}, t) = \langle \psi_1^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \psi_2(\mathbf{r}, t) \rangle$ sont les cohérences (au sens de la physique atomique et de l'optique quantique, voir Réf. [58]). On retrouve alors exactement l'expression (1.45) du potentiel effectif $\hat{U}$. L'équation cinétique opératorielle à laquelle on aboutit est :

$$\frac{d\hat{\rho}_1}{dt} + (i\hbar)^{-1} [\hat{\rho}_1, \hat{H}_1 + \hat{V}^{mf}]_- = 0 \quad (1.62)$$

C'est l'équivalent quantique de l'équation de Vlasov (voir [37] par exemple). A partir de là, on procède comme précédemment pour dériver l'équation cinétique : transformée de Wigner et développement en gradients au premier ordre. L'équation cinétique obtenue reproduit le membre de gauche de l'équation (1.47). Il n'y a bien

sur pas d'intégrale de collision car nous avons utilisé l'approximation du champ moyen, ce qui fait que tous les termes proportionnels à a^2 ont été négligés. Dans ce formalisme, l'intégrale de collision est en général ajoutée à la main sous la forme d'une approximation de temps de relaxation [56].

1.4 Discussion

Dans ce paragraphe, nous comparons les trois méthodes différentes que nous avons utilisées pour écrire l'équation cinétique d'un gaz d'atomes avec des états internes : l'ansatz de matrice S (ou méthode LL), l'ansatz de Yvon-Snider (YS) et l'approximation du champ moyen.

A l'ordre zéro du développement en gradients, LL et YS donnent le même résultat : une intégrale de collision de Boltzmann et un champ moyen de spin. L'approximation du champ moyen obtient le champ moyen de spin, qui ne coïncide avec les deux autres approches que dans la limite de basse énergie, à cause de l'utilisation d'un pseudo-potentiel. Nous insistons sur le fait que ce champ moyen de spin existe dans un gaz de Bose *non-dégénéré*. Dans un condensat de Bose-Einstein (BEC), à très basse température, ce champ moyen de spin n'existe pas, car le champ moyen d'échange est absent. On sait en effet qu'il n'y a pas d'échange dans un BEC car tous les bosons sont dans le même état quantique. Il y a cependant un mécanisme différent qui peut créer des ondes de spin : c'est le "couple quantique" ("quantum torque" en anglais) [59], dont l'origine est purement cinétique ; il résulte de ce qu'en mécanique quantique un gradient de la phase de chaque composante correspond à de l'énergie cinétique qui modifie l'évolution de la phase relative et donc de la polarisation de spin transverse [60].

Au premier ordre du développement en gradients et pour la diffusion vers l'avant, LL, YS et l'approximation du champ moyen donnent tous le même terme de champ moyen de son zéro (ou champ moyen scalaire) dans la limite de basse énergie. Plus généralement, LL et YS donnent le même terme de champ moyen de son zéro sans prendre cette limite. Nous n'avons pas, pour l'instant, étudié le cas de la diffusion latérale au premier ordre du développement en gradients, ni les ordres supérieurs du développement en gradients.

Nous insistons sur le fait que dans un gaz dilué et non-dégénéré, le champ moyen de spin domine le champ moyen de son zéro, car le premier apparaît un ordre plus bas que le deuxième dans le développement en gradients. Ceci explique que les modes collectifs de type son zéro ne se propagent pas aussi facilement que les ondes de spin dans ce système.

La "démonstration" de l'équation cinétique par les méthodes collisionnelles confirme que les résultats de l'approximation du champ moyen sont corrects à l'ordre le plus bas en longueur de diffusion. Ce n'est pas trivial : en effet, le champ moyen est généralement supposé jouer un rôle soit dans les systèmes avec des interactions à longue portée (équation de Vlasov pour un plasma [37]), soit dans les

systèmes dégénérés fortement interagissants décrits en termes de quasi-particules (équation de Landau pour un liquide de Fermi [32, 49, 34]). Nous remarquons finalement que lorsqu'on décrit un gaz dilué peu dégénéré comme un gaz de quasi-particules (voir les travaux de Bashkin [61], par exemple), une quasi-particule est simplement une particule dont l'énergie cinétique $p^2/2m$ est déplacée par un terme de champ moyen local, de telle sorte que le terme de dérive "cinétique" de l'équation de transport des quasi-particules n'est pas modifié.

1.5 Appendice : Calcul de la transformée de Wigner de l'équation cinétique opératorielle

Dans cet appendice, nous détaillons le calcul de la transformée de Wigner de l'ansatz de matrice S de l'équation (1.21). Nous allons suivre de prêt un calcul similaire présenté dans l'appendice de l'article de Laloë et Mullin [47]. La transformée de Wigner de l'ansatz de Yvon-Snyder, équation (1.9) mais sans niveaux internes et sans échange, y est obtenue au premier ordre du développement en gradients.

Nous définissons la matrice T sur couche de masse ("on-shell T matrix" en anglais) $\mathcal{T}$ par

$$\hat{S} = \hat{1} - i2\pi\hat{\mathcal{T}} \quad (1.63)$$

Ceci permet de réécrire le coeur de l'ansatz de l'équation (1.21) de la manière suivante

$$\begin{aligned} \hat{S}\hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2)\hat{S}^\dagger - \hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2) &= -i2\pi\hat{\mathcal{T}}\hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2) + \text{c.c.} \\ &+ (2\pi)^2\hat{\mathcal{T}}\hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2)\hat{\mathcal{T}}^\dagger \end{aligned} \quad (1.64)$$

où c.c. signifie le complexe conjugué du terme précédent. Les deux premiers termes sont linéaires en la matrice T , le dernier est quadratique. La transformée de Wigner $\hat{F}_T$ de l'opérateur qui est sous la trace dans l'équation (1.21) et qui est linéaire en la matrice T est

$$\begin{aligned} \hat{F}_T(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{P}, \mathbf{p}) &= -i(2\pi)^{-5}\hbar^{-6} \int d^3K \int d^3\kappa e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{i\kappa\cdot\mathbf{r}} \\ &\times \langle \mathbf{K}_+, \mathbf{k}_+ | \frac{\hat{1} + \epsilon\hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{T}} \hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2) \frac{\hat{1} + \epsilon\hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} | \mathbf{K}_-, \mathbf{k}_- \rangle + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (1.65)$$

où

$$\mathbf{K}_\pm = \frac{\mathbf{P}}{\hbar} \pm \frac{\mathbf{K}}{2}; \quad \mathbf{k}_\pm = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \pm \frac{\mathbf{k}}{2} \quad (1.66)$$

En introduisant deux relations de fermeture pour les vecteurs d'onde relatifs $\mathbf{k}_1$ et

$\mathbf{k}_2$, le membre de droite de l'équation (1.65) est égale à

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2i(2\pi)^5 \hbar^6} \int d^3 K \int d^3 \kappa \int d^3 k_1 \int d^3 k_2 e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{r}} \\ & \times \left(T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}_1) + \epsilon T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}_1) \hat{P}_S \right) \delta(E_{k_+} - E_{k_1}) \\ & \times \langle \mathbf{K}_+, \mathbf{k}_1 | \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) | \mathbf{K}_-, \mathbf{k}_2 \rangle \left(\delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_-) + \epsilon \delta(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_-) \hat{P}_S \right) + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (1.67)$$

où $\hat{P}_S$ est l'opérateur d'échange dans l'espace de spin.

Nous utilisons ensuite la transformée de Wigner inverse pour faire apparaître dans l'équation (1.67) la transformée de Wigner $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ de $\hat{\rho}_1$ et remplacer l'élément de matrice du produit des $\hat{\rho}$'s par :

$$\begin{aligned} & \hbar^6 \int d^3 R' \int d^3 r' e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}'} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}'} \\ & \times \hat{\rho} \left(\mathbf{R}' + \frac{\mathbf{r}'}{2}, \frac{\mathbf{P} + \hbar \mathbf{k}_1 + \hbar \mathbf{k}_2}{2} \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{R}' - \frac{\mathbf{r}'}{2}, \frac{\mathbf{P} - \hbar \mathbf{k}_1 - \hbar \mathbf{k}_2}{2} \right) \end{aligned} \quad (1.68)$$

Lorsqu'on insère le résultat dans l'équation (1.67), on fait apparaître une fonction delta :

$$\int d^3 K e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \quad (1.69)$$

En prenant la trace sur l'espace (orbital et interne) de la particule 2, nous obtenons finalement l'expression suivante de la transformée de Wigner $\hat{I}_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$ du terme linéaire en la matrice T de l'ansatz (1.21)

$$\begin{aligned} \hat{I}_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \frac{1}{2i(2\pi)^2 \Delta t} \int d^3 q \int d^3 r \int d^3 \kappa \int d^3 k'_1 \int d^3 k'_2 \int d^3 r' \\ & \times e^{i\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \delta(E_{k_+} - E_{k'_1}) \\ & \times \left[\delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_-) T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) f \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \right. \\ & + \epsilon \delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_-) T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \\ & + \epsilon \delta(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}_-) T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \\ & \left. + \delta(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}_-) T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) f \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \right] \\ & + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (1.70)$$

avec les notations (1.14) et

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; & \mathbf{k}_{\pm} &= \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \pm \frac{\mathbf{\kappa}}{2} \\ \mathbf{p}_1'' &= \mathbf{p}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2} + \hbar \frac{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2}{2}; & \mathbf{p}_2'' &= \mathbf{p}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2} - \hbar \frac{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2}{2} \end{aligned} \quad (1.71)$$

où nous avons utilisé la définition de f comme trace sur l'espace de spin de $\hat{\rho}$, voir l'équation (1.13).

Le même type de calcul est possible pour le terme quadratique en la matrice T dans (1.21). On obtient l'expression suivante de sa transformée de Wigner

$$\begin{aligned}
\hat{I}_{T^2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = & \frac{1}{4\pi\Delta t} \int d^3q \int d^3r \int d^3\kappa \int d^3k'_1 \int d^3k'_2 \int d^3r' \\
& \times e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'_2-\mathbf{k}'_1)\cdot\mathbf{r}'} \delta(E_{k_+} - E_{k'_1}) \delta(E_{k_-} - E_{k'_2}) \\
& \times \left[T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) T(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) f \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \right. \\
& + \epsilon T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) T(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \\
& + \epsilon T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) T(-\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \\
& \left. + T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) T(-\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* f \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \right] \\
& (1.72)
\end{aligned}$$

A l'instar des références [45, 47], nous supposons à présent que $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ a des variations suffisamment douces dans l'espace (sur des distances microscopiques) pour développer le produit de $\hat{\rho}$ et f dans les équations (1.70) et (1.72) comme suit :

$$\begin{aligned}
& \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2'') - \frac{\mathbf{r}}{2} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2'')] \\
& + \frac{\mathbf{r}'}{2} \cdot [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'') \nabla_{\mathbf{r}_1} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2'') - (\nabla_{\mathbf{r}_1} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'')) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2'') + \dots] \quad (1.73)
\end{aligned}$$

Le premier terme de l'équation précédente est local, les deux suivant constituent le premier ordre du développement en gradients (termes non-locaux). Une équation semblable existe pour le produit des $\hat{\rho}$'s dans les équations (1.70) et (1.72).

(1) Terme local

Nous commençons par calculer le terme d'ordre zéro du développement en gradients. Les trois intégrales suivantes apparaissent :

$$\begin{aligned}
& \int d^3r e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{\kappa}); \quad \int d^3r' e^{i(\mathbf{k}'_2-\mathbf{k}'_1)\cdot\mathbf{r}'} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \\
& \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}'_2+\mathbf{k}'_1)\cdot\mathbf{r}'} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}'_1) \quad (1.74)
\end{aligned}$$

Les termes linéaires en la matrice T deviennent

$$\begin{aligned}
\hat{I}_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = & \frac{(2\pi)^4}{2i \Delta t} \int d^3 q \int d^3 k' \delta(E_k - E_{k'}) \\
& \times \left[\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \right. \\
& + \epsilon \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \\
& + \epsilon \delta(\mathbf{k}' + \mathbf{k}) T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \\
& \left. + \delta(\mathbf{k}' + \mathbf{k}) T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \right] \\
& + \text{c.c.}
\end{aligned} \tag{1.75}$$

Dans l'équation précédente, on remarque que des carrés de fonctions delta de l'énergie $\delta(E_k) \delta(\mathbf{k}) \propto [\delta(E_k)]^2$ apparaissent. On utilise alors l'astuce bien connue de la théorie formelle des collisions (voir Ref. [43], par exemple)

$$[\delta(E_k)]^2 = \frac{\Delta t}{2\pi \hbar} \delta(E_k) \tag{1.76}$$

où Δt est une durée supérieure à celle d'une collision, qui se simplifie avec celle présente dans l'ansatz de matrice S (1.21). Les mêmes manipulations peuvent être répétées avec le terme quadratique en la matrice T , elles aboutissent à :

$$\begin{aligned}
\hat{I}_{T^2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = & \frac{(2\pi)^4}{2\hbar} \int d^3 q \int d^3 k' \delta(E_k - E_{k'}) \\
& \times \left[T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \right. \\
& + \epsilon T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \\
& + \epsilon T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \\
& \left. + T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \right]
\end{aligned} \tag{1.77}$$

Nous allons avoir besoin de différentes propriétés générales de la matrice T . En plus des sections efficaces différentielle $\sigma_k(\hat{k}, \hat{k}')$ et totale $\sigma_T(k)$ définies dans l'équation (1.15), nous introduisons les sections efficaces suivantes (voir Réf. [3])

$$\begin{aligned}
T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) &= \frac{\hbar^2 k}{i 8 \pi^3 m} (\sigma_{fwd.}^{ex.}(k) - i \tau_{fwd.}^{ex.}(k)) \\
T(-\mathbf{k}', \mathbf{k}) T(\mathbf{k}', \mathbf{k})^* &= \frac{\hbar^4}{4 \pi^4 m^2} \left(\sigma_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') - i \tau_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') \right)
\end{aligned} \tag{1.78}$$

L'unitarité de la matrice S , nécessaire à la conservation de la probabilité en mécanique quantique, se manifeste dans le théorème optique :

$$\frac{T(\mathbf{k}, \mathbf{k})}{2i} + \text{c.c.} = \text{Im } T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 k}{(2\pi)^3 m} \sigma_T(k) \tag{1.79}$$

L'invariance par rotation dans l'espace du Hamiltonien d'interaction peut être utilisée pour montrer que :

$$T(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (1.80)$$

Nous calculons ensuite l'intégrale sur la norme du vecteur d'onde $\mathbf{k}'$ dans les équations (1.75) et (1.77) en utilisant les propriétés mentionnées de la matrice T . Nous obtenons la transformée de Wigner $\hat{I}_W = \hat{I}_T + \hat{I}_{T^2}$ à l'ordre zéro du développement en gradients de l'ansatz de matrice S :

$$\begin{aligned} \hat{I}_W(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = & - \int d^3q \frac{q}{m} \left\{ \left[\sigma_T(k) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \right. \right. \\ & + \frac{\epsilon}{2} \left(\sigma_{fwd.}^{ex.}(k) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_+ + i\tau_{fwd.}^{ex.}(k) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_- \right) \left. \right] \\ & - \int d^2\hat{k}' \left[\sigma_k(\hat{k}, \hat{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2') + \frac{\epsilon}{2} \left(\sigma_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2')]_+ \right. \right. \\ & \left. \left. + i\tau_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2')]_- \right) \right] \left. \right\} \quad (1.81) \end{aligned}$$

avec les notations (1.14). Ce terme local est “l'intégrale de collision” LL [3]. Nous écrivons intégrale de collision entre guillemets car dans ce manuscrit la dénomination intégrale de collision est réservée aux termes quadratiques en la matrice T alors que “l'intégrale de collision” LL contient des termes linéaires (termes de commutateurs). Ces termes sont habituellement écrit dans le membre de gauche de l'équation cinétique. Ils correspondent dans l'équation précédente au champ moyen de spin, à l'origine des ondes de spin dans les gaz froids.

La limite de basse énergie des sections efficaces est obtenue à partir de l'expression de la matrice T dans l'onde s (voir équation (1.5)) :

$$\begin{aligned} \sigma_T(k) &\sim 4\pi a^2 & \sigma_k(\hat{k}, \hat{k}') &\sim a^2 \\ \sigma_{fwd.}^{ex.}(k) &\sim 4\pi a^2 & \sigma_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') &\sim a^2 \\ \tau_{fwd.}^{ex.}(k) &\sim -4\pi a/k & \tau_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') &\rightarrow 0 \end{aligned}$$

quand $k \rightarrow 0$, voir Ref. [3]. Quand ces expressions sont introduites dans (1.81), l'intégrale de collision de l'équation (1.26) est obtenue, ainsi que le terme de champ moyen de spin contenu dans le commutateur de l'équation (1.24). Les autres termes de champ moyen (champ moyen de son zéro) contenus dans l'anticommutateur vont être obtenus au premier ordre du développement en gradients que nous calculons dans la suite.

(2) Termes du premier ordre

Dans cette partie, nous ne garderons que les termes du premier ordre qui sont linéaires en la matrice T . Les autres termes (quadratiques en la matrice T) sont

négligeables car ils contiennent plusieurs petits paramètres (premier ordre du développement en gradient et carré de la longueur de diffusion a^2).

(2-a) gradients $\mathbf{r}$ Les termes du premier ordre font apparaître le gradient d'une fonction delta

$$\int d^3r \, \mathbf{r} \, e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} = -i(2\pi)^3 \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \delta(\boldsymbol{\kappa})$$

ce qui signifie que nous devons prendre la dérivée par rapport à $\boldsymbol{\kappa}$ de (moins) la fonction sous l'intégrale. Nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{(2\pi)^3}{2} \int d^3q \Big\{ & \text{Re } T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \, \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \\ & - \nabla_{\mathbf{p}} [\text{Re } T(\mathbf{k}, \mathbf{k})] \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \\ & + \frac{\epsilon}{2} T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \, \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \\ & - \frac{\epsilon}{2} \nabla_{\mathbf{p}} [T(\mathbf{k}, \mathbf{k})] \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \\ & + \frac{\epsilon}{2} T(\mathbf{k}, \mathbf{k})^* \, \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)] \\ & - \frac{\epsilon}{2} \nabla_{\mathbf{p}} [T(\mathbf{k}, \mathbf{k})^*] \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)] \Big\} \end{aligned} \quad (1.82)$$

(2-b) gradients $\mathbf{r}'$ Les intégrales suivantes apparaissent

$$\begin{aligned} \int d^3r' \, e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \mathbf{r}' &= -i(2\pi)^3 \nabla_{\mathbf{k}'_1} \delta(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \\ \int d^3r' \, e^{-i(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \mathbf{r}' &= -i(2\pi)^3 \nabla_{\mathbf{k}'_1} \delta(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}'_1) \end{aligned} \quad (1.83)$$

Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \frac{(2\pi)^3}{2} \int d^3q \, \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \Big\{ & \text{Re } T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \, [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) - f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)] \\ & + \frac{\epsilon}{2} T(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) \, [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) - \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)] \\ & + \frac{\epsilon}{2} T(\mathbf{k}, -\mathbf{k})^* \, [\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) - \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \Big\} \end{aligned} \quad (1.84)$$

L'expression de la matrice T à l'ordre le plus bas en la longueur de diffusion (voir l'équation (1.5)) est :

$$(2\pi)^3 T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \simeq g$$

Elle est indépendante de $\mathbf{k}$. En utilisant cette expression dans les équations (1.82) et (1.84), nous obtenons le terme d'ordre un suivant :

$$\frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (g n(\mathbf{r}_1) \hat{1} + \epsilon g \hat{n}(\mathbf{r}_1))]_+$$

C'est le terme de champ moyen (de son zéro) présent dans l'anticommutateur de l'équation cinétique (1.24).

Nous avons également fait des calculs préliminaires pour comparer, de manière générale (i.e. sans l'hypothèse de basse énergie), l'ansatz d'Yvon-Snider et celui de matrice S dans le cas sans spin et sans échange. L'ordre 0 du développement en gradients est le même (intégrale de Boltzmann), l'ordre 1 linéaire en matrice T également. Par contre, il semble que l'ordre 1 quadratique en matrice T soit différent.

1.6 Appendice : Comparaison des ansatz de matrice S et d'Yvon-Snider

Dans cet appendice, nous comparons l'ansatz d'Yvon-Snider (YS) à l'ansatz de matrice S (LL) dans le cas simple où il n'y a pas de niveaux internes et où on néglige l'échange ($\epsilon = 0$). La comparaison est faite en prenant la transformée de Wigner des équations opératoriels suivantes, où :

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{coll}^{(YS)} \rho_1(1) = \frac{1}{i\hbar} Tr_2 \left\{ [V(1,2), \Omega \rho_1(1) \rho_1(2) \Omega^\dagger]_- \right\} \quad (1.85)$$

est l'ansatz d'Yvon-Snider, et :

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{coll}^{(LL)} \rho_1(1) = \frac{1}{\Delta t} Tr_2 \{ S \rho_1(1) \rho_1(2) S^\dagger - \rho_1(1) \rho_1(2) \} \quad (1.86)$$

est l'ansatz de matrice S . Nous utilisons les mêmes notations que dans l'appendice précédent ; de plus $\hbar = 1$.

1.6.1 Termes linéaires en la matrice T

Nous commençons par étudier les termes linéaires en la matrice T dans les ansatz (1.85) et (1.86) et calculons leur transformée de Wigner mais sans développer en gradients. Le calcul de la transformée de Wigner de (1.85) est fait dans [47] et la partie linéaire en T peut s'écrire :

$$\begin{aligned} I_T^{(YS)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \frac{2i}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3\kappa \int d^3k'_1 \int d^3k'_2 \int d^3r \int d^3r' e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \\ &\times f\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1\right) f\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2\right) \\ &\times \left\{ T(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* \delta(\mathbf{k}_+ - \mathbf{k}'_1) - T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \delta(\mathbf{k}_- - \mathbf{k}'_2) \right\} \end{aligned} \quad (1.87)$$

La transformée de Wigner de (1.86) peut s'écrire sous une forme similaire :

$$\begin{aligned}
I_T^{(LL)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \frac{2i}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3\kappa \int d^3k'_1 \int d^3k'_2 \int d^3r \int d^3r' e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \\
&\times f\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1''\right) f\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2''\right) \\
&\times \left\{ T(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* \delta(\mathbf{k}_+ - \mathbf{k}'_1) \frac{2\pi\delta(E_{k'_2} - E_{k_-})}{\Delta t} \right. \\
&\left. - T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \delta(\mathbf{k}_- - \mathbf{k}'_2) \frac{2\pi\delta(E_{k'_1} - E_{k_+})}{\Delta t} \right\} \quad (1.88)
\end{aligned}$$

Cette dernière équation est équivalente à (1.70) dans le cas où il n'y a pas de niveaux internes et pas d'échange.

La seule différence entre les équations (1.87) et (1.88) provient des facteurs $2\pi\delta(E)/\Delta t$ dans l'équation (1.88). Or on sait qu'à chaque ordre du développement en gradients du produit $f(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'') f(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'')$ apparaît une deuxième fonction delta de conservation de l'énergie identique à la première⁵ de telle sorte que la simplification

$$\frac{2\pi}{\Delta t} [\delta(E)]^2 = \delta(E) \quad (1.89)$$

se produit (voir équation (1.76)). Nous avons vérifié explicitement que cette simplification se produit aux deux premiers ordres du développement en gradients, mais il est facile de voir qu'elle se produit à tous les ordres. Ainsi, en ce qui concerne les termes linéaires en la matrice T , les ansatz YS et LL donnent exactement la même contribution à chaque ordre du développement en gradients.

1.6.2 Termes quadratiques en la matrice T

Nous considérons maintenant les termes quadratiques en la matrice T dans les ansatz (1.85) et (1.86). Le calcul de la transformée de Wigner de (1.85) est fait dans [47] et le partie quadratique en T peut s'écrire :

$$\begin{aligned}
I_{T^2}^{(YS)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \frac{2i}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3\kappa \int d^3k'_1 \int d^3k'_2 \int d^3r \int d^3r' e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \\
&\times f\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1''\right) f\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2''\right) T(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \\
&\times \left\{ \frac{i}{E_{k_+} - E_{k'_1} + i0^+} - \frac{i}{E_{k_-} - E_{k'_2} - i0^+} \right\} \quad (1.90)
\end{aligned}$$

⁵Plus précisément, le facteur $\delta(\mathbf{k}_+ - \mathbf{k}'_1) \delta(E_{k'_2} - E_{k_-}) 2\pi/\Delta t$ est proportionnel à $\delta(E_{k_+} - E_{k'_1}) \delta(E_{k'_2} - E_{k_-}) 2\pi/\Delta t$. De plus, à chaque ordre du développement en gradients, on peut calculer les intégrales sur $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ et faire apparaître des fonctions delta $\delta(\kappa)$ et $\delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1)$ qui impliquent que $k_+ = k_- = k$ et $k'_1 = k'_2 = k'$. Ceci fait apparaître $[\delta(E_{k'} - E_k)]^2 2\pi/\Delta t$ que l'on simplifie en $\delta(E_{k'} - E_k)$.

La transformée de Wigner de (1.86) peut s'écrire sous une forme similaire :

$$\begin{aligned}
I_{T^2}^{(LL)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \frac{2i}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3\kappa \int d^3k'_1 \int d^3k'_2 \int d^3r \int d^3r' e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \\
&\times f\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1''\right) f\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2''\right) T(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \\
&\times \left\{ \frac{2\pi\delta(E_{k_+} - E_{k'_1})}{\Delta t} 2\pi\delta(E_{k_-} - E_{k'_2}) \right\}
\end{aligned} \tag{1.91}$$

Cette dernière équation est équivalente à (1.72) dans le cas où il n'y a pas de niveaux internes et pas d'échange.

La seule différence entre les équations (1.90) et (1.91) provient des termes entre crochets $\{\dots\}$ dans la troisième ligne de (1.90) et (1.91). On remarque que si $\kappa = 0$ et $\mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}'_1$ (voir la note de bas de page précédente), le terme entre crochets dans la troisième ligne de (1.90) devient :

$$\begin{aligned}
\frac{i}{E_k - E_{k'} + i0^+} - \frac{i}{E_k - E_{k'} - i0^+} &= i \frac{P}{E_k - E_{k'}} + \pi\delta(E_k - E_{k'}) \\
&- i \frac{P}{E_k - E_{k'}} + \pi\delta(E_k - E_{k'}) \\
&= 2\pi\delta(E_k - E_{k'})
\end{aligned} \tag{1.92}$$

et celui dans la troisième ligne de (1.91) devient :

$$2\pi\delta(E_k - E_{k'}) \frac{2\pi\delta(E_k - E_{k'})}{\Delta t} = 2\pi\delta(E_k - E_{k'}) \tag{1.93}$$

Ceci permet de penser que les deux ansatz vont donner des termes identiques à chaque ordre du développement en gradients.

Nous avons vérifié qu'à l'ordre zéro du développement en gradients, des fonctions delta $\delta(\kappa)$ et $\delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1)$ apparaissent : elles font que les simplifications (1.92) et (1.93) se produisent. Ainsi les ansatz YS et LL donnent la même contribution à l'ordre zéro. Par contre, à l'ordre un, les termes qui font intervenir des parties principales P (dans l'ansatz YS) ne disparaissent pas. En effet, à l'ordre 1, la différence entre les transformées de Wigner de l'ansatz LL et de l'ansatz YS s'écrit :

$$\begin{aligned}
I_{T^2}^{(LL)} - I_{T^2}^{(YS)} &= (2\pi)^3 \int d^3k \int d^3k' |T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \nabla_{\mathbf{k}} \left(\frac{P}{E_{k'} - E_k} \right) \\
&\cdot \left[f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \mathbf{k}' + \mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{r}_1} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \right. \\
&- f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{r}_1} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \mathbf{k}' + \mathbf{k}) \\
&\left. + \nabla_{\mathbf{r}_1} \left(f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \mathbf{k} + \mathbf{k}') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \mathbf{k} - \mathbf{k}') \right) \right]
\end{aligned} \tag{1.94}$$

Cette différence ne semble pas être nulle.

1.6.3 Conclusion

En conclusion, les ansatz YS et LL, équations (1.85) et (1.86), donnent les mêmes termes linéaires en la matrice T à tous les ordres du développement en gradients. Ils donnent aussi les mêmes termes quadratiques en la matrice T à l'ordre zéro mais il semble que les ordres supérieurs soient différents.

1.7 Appendice : Remarques sur le champ moyen

Dans cette appendice, nous voulons faire quelques remarques générales sur la notion de champ moyen dans l'équation cinétique. Nous commençons par discuter du cas d'un gaz d'atomes sans spin. Le champ moyen modifie les termes de dérive de l'équation cinétique de Boltzmann. Les termes de champ moyen sont linéaires en longueur de diffusion et proviennent essentiellement de la diffusion vers l'avant⁶, non-locaux et décrivent des processus non-dissipatifs, bien qu'ils puissent contribuer à la relaxation des modes collectifs, voir le phénomène de “Landau damping” [32]. Au contraire, l'intégrale de collision est quadratique en longueur de diffusion, locale, et décrit des processus dissipatifs ; on parle de relaxation collisionnelle pour les modes collectifs.

Dans un gaz avec spin, il faut distinguer le champ moyen *scalaire* ou de son zéro et le champ moyen de *spin*. Le premier est semblable au cas du champ moyen dans un gaz sans spin. Il est à l'origine des modes collectifs de type son zéro (voir Réf. [32] pour le son zéro dans un liquide de Fermi normal). Le deuxième est différent pour plusieurs raisons. Il apparaît déjà à l'ordre zéro du développement en gradient comme l'ont montré LL [3]. Ceci est dû au fait que le champ moyen de spin est local dans l'espace de position (c'est ce que l'on entend généralement par local) mais non-local dans l'espace de spin. Dans le contexte des gaz dilués non-dégénérés, il résulte du moyennage de l'effet de rotation des spins identiques (ISRE) [3] qui est discuté dans le chapitre suivant. Le champ moyen de spin donne naissance à des modes collectifs de type ondes de spin (voir [7] et plus loin). L'étude du champ moyen en théorie des champs montre que le champ moyen de son zéro correspond au terme de Hartree ou terme direct et le champ moyen de spin au terme de Fock ou terme d'échange dans l'approximation du champ moyen.

Depuis les travaux de Bogolubov [36], on sait que même lorsque seules les collisions binaires sont considérées (ce qui est le cas ici), les corrections non-locales à l'équation cinétique de Boltzmann impliquent des corrections en densité aux coefficients de transport appelées corrections du Viriel et aussi aux propriétés d'équilibre du gaz. Par exemple, l'équation d'état du gaz n'est pas celle du gaz parfait. Les résultats exacts de la mécanique statistique d'équilibre, tels que la formule de Beth-Uhlenbeck [63] pour le deuxième coefficient du Viriel, fournissent alors un

⁶Lhuillier et Laloë ont montré que la diffusion latérale contribue également, mais cette contribution est négligeable dans la limite de basse énergie [3, 62].

test pour les équations cinétiques [64].

Chapitre 2

Ondes de spin dans un gaz froid polarisé

Nous discutons dans ce chapitre du transport de spin dans un gaz froid polarisé en utilisant l'équation cinétique obtenue précédemment. Dans un fluide non polarisé, le transport de spin est essentiellement diffusif. Mais dans un fluide polarisé et à basse température, il existe des modes oscillants appelés ondes de spin. L'objectif de ce chapitre est d'étudier les ondes de spin dans un gaz froid polarisé.

Les ondes de spin sont bien connues dans l'étude des solides ferromagnétiques à basse température : ce sont les ondes de spin de Bloch (voir Réf. [65] par exemple). Elles correspondent à la propagation d'une faible perturbation locale de la polarisation de spin, qui est maximale à température nulle dans un ferromagnétique, et sont dues au champ moyen créé par "l'interaction d'échange" entre spins voisins. Des ondes de spin existent également dans les liquides de Fermi dégénérés en présence d'un champ magnétique ; elles sont appelées ondes de spin de Silin [66, 49, 67]. Plus étonnant est l'existence d'ondes de spin pour les gaz polarisés peu dégénérés. Ces ondes de spin ont été prédites par Bashkin [6] et indépendamment par Lhuillier et Laloë [7]. Elles ont également été étudiées, dans un formalisme différent, par Lévy et Ruckenstein [68]. Suite à leur prédiction théorique, ces ondes de spin transverse ont été observées, au cours des années 80, dans l' $\text{H}\downarrow$ gazeux [8], dans des solutions diluées d' $^3\text{He}\uparrow$ dans de l' ^4He superfluide [9] et dans l' $^3\text{He}\uparrow$ gazeux [10]. Une introduction pédagogique aux ondes de spin dans les gaz polarisés non-dégénérés peut être trouvée dans les Réfs. [33, 69].

A la fin de l'année 2001, l'équipe de Cornell au JILA a observé un étrange phénomène de séparation transitoire d'états de pseudo-spin dans un gaz d'alcalins ultrafroid ("anomalous spin-state segregation") [2]. Nous montrons dans ce chapitre que ce phénomène s'interprète comme l'excitation d'ondes de spin longitudinales [4, 27, 5]. Cette interprétation a été confirmée par d'autres mesures, qui ont permis d'observer des ondes de spin transverse dans ce gaz atomique piégé [54].

Dans l'équation cinétique, le terme à l'origine des ondes de spin est le champ moyen de spin. A un niveau plus fondamental, le champ moyen de spin est le

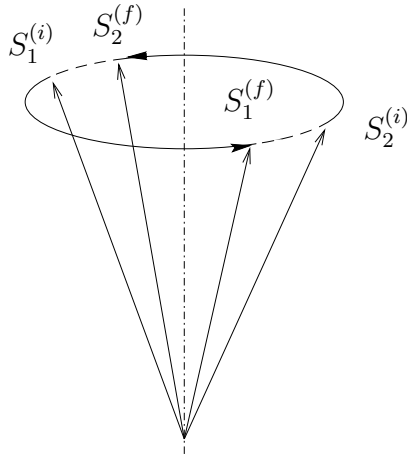


FIG. 2.1 – $S_1^{(i)}$ et $S_2^{(i)}$ sont les polarisations avant collision (polarisations initiales); $S_1^{(f)}$ et $S_2^{(f)}$ sont les polarisations finales.

résultat d'une moyenne sur de nombreuses collisions binaires au cours desquelles se produit l'effet de rotation des spins identiques ("identical spin rotation effect" ou ISRE en anglais). Dans ce chapitre, nous commençons par discuter de l'effet de rotation des spins identiques. Nous présentons ensuite les expériences réalisées au JILA, avant de proposer un modèle théorique basé sur l'équation cinétique. Dans la suite, nous insistons sur certains aspects originaux des ondes de spin observées au JILA : leur grande amplitude et leur existence dans un régime non-hydrodynamique. Puis nous discutons de la fin du phénomène, c'est-à-dire du retour à l'équilibre du gaz suite à l'excitation des ondes de spin. Finalement, en imaginant une situation où le système est dans une superposition macroscopique des états internes, nous étudions l'évolution de la cohérence entre états internes à l'aide de l'équation cinétique et spéculons sur sa disparition liée au phénomène de décohérence.

2.1 Effet de rotation des spins identiques

L'effet de rotation des spins identiques (ISRE) a été introduit par Lhuillier et Laloë [3]. Il s'agit d'un phénomène microscopique qui se produit au cours d'une collision binaire entre deux atomes identiques possédant des niveaux internes, i.e. un spin $1/2$ par exemple. L'effet est une conséquence de l'indiscernabilité quantique. Il se manifeste par une rotation des spins autour de leur somme en sens opposés pour des bosons et des fermions, voir Fig. 2.1. Si un atome avec une polarisation dans une direction donnée traverse un gaz d'atomes identiques polarisés dans une autre direction, la polarisation de spin de l'atome transmis précesse autour de la direction de polarisation du gaz. C'est un cas qui rappelle un peu celui de l'effet

Faraday où on observe la rotation de la polarisation des photons à la traversée d'un milieu matériel en présence d'un champ magnétique.

L'ISRE se produit essentiellement grâce à la diffusion vers l'avant. En théorie des collisions, on sait que les interférences vers l'avant sont responsables de l'absorption des particules : c'est la signification du théorème optique. Ce n'est pas tout : pour des particules sans spin, les interférences vers l'avant créent des effets de retard [70]. Pour des particules avec spin, elles impliquent, en plus, l'effet de rotation des spins identiques.

La diffusion vers l'avant résulte d'un effet d'interférence entre l'onde transmise et l'onde diffusée. Au cours d'une collision en onde s entre deux particules, la diffusion vers l'avant est responsable d'effets proportionnels à l'amplitude de diffusion $f_k(\theta) \simeq -a$, où a est la longueur de diffusion. Au contraire, la diffusion latérale est responsable d'effets proportionnels au carré du module de l'amplitude de diffusion ; par exemple, la section efficace totale de diffusion est proportionnelle à a^2 . La probabilité relative de la diffusion latérale et de la diffusion vers l'avant¹ est donc d'ordre ka , où k est le vecteur d'onde relatif des deux particules.

Dans un gaz, l'effet cumulé des collisions vers l'avant donne naissance au champ moyen. A basse température, dans le régime de collision quantique où $ka \sim a/\lambda_T \ll 1$, la diffusion vers l'avant domine la diffusion latérale et le champ moyen joue donc un rôle prépondérant. Pour des atomes sans spin, les effets de retard créent le champ moyen scalaire à l'origine du son zéro. Pour des atomes avec spin, l'ISRE crée, en plus, un champ moyen de spin. Ce dernier a des conséquences importantes sur le transport à basse température dans un gaz polarisé : il est à l'origine des ondes de spin.

2.2 Expérience de “séparation des états de spin”

Nous nous intéressons à présent à une expérience réalisée fin 2001 au JILA sur un gaz froid piégé de ^{87}Rb [2]. Des atomes bosoniques de ^{87}Rb avec deux états hyperfins particuliers appelés $|1\rangle \equiv |F=1, m_F=-1\rangle$ et $|2\rangle \equiv |F=2, m_F=1\rangle$ sont confinés dans un piège magnétique en forme de cigare, voir Fig. 2.2. Les fréquences de piégeage axiale et radiale sont $\omega_{ax}/2\pi = 7$ Hz et $\omega_{rad}/2\pi = 230$ Hz. La direction axiale est notée $\mathcal{O}x$. La température du gaz $T \sim 0.6$ μK . C'est environ deux fois la température de condensation de Bose-Einstein, i.e. que le gaz est peu dégénéré. La densité au centre du piège est $n(0) \simeq 1.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. La température du gaz est suffisamment basse pour que les collisions aient lieu dans le régime quantique. Elles sont décrites par les trois longueurs de diffusion $a_{11} = 100.9a_0$, $a_{22} = 95.6a_0$ et $a_{12} = 98.2a_0$, où a_0 est le rayon de Bohr, qui sont bien plus petites

¹Dans le premier appendice du chapitre précédent, on donne les définitions de la section efficace totale de collision $\sigma_T(k) \simeq 4\pi a^2$ et de la section efficace de collision pour la diffusion vers l'avant $\tau_{fwd.}^{ex.}(k) \simeq -4\pi a/k$. Leur rapport est ka .

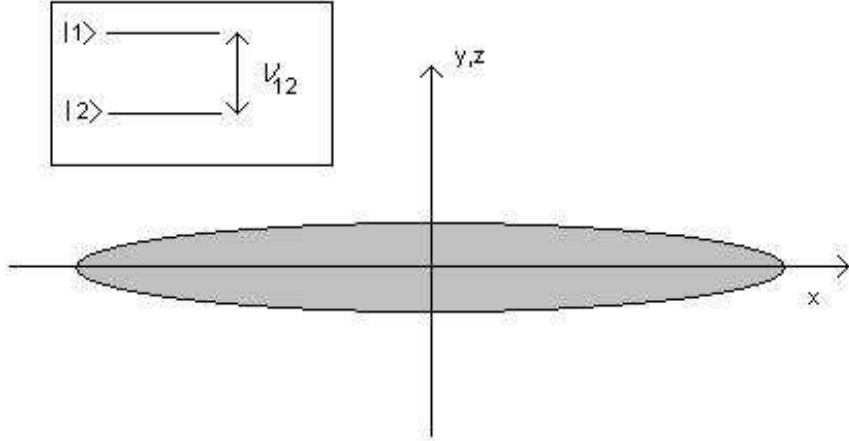


FIG. 2.2 – Piège en forme de cigare utilisé dans l'expérience du JILA. Les pulsations de piégeage axiale et radiale sont $\omega_{ax} = \omega_x = 2\pi \times 7$ rad/s et $\omega_{rad} = \omega_{y,z} = 2\pi \times 230$ rad/s. La différence d'énergie entre les deux états internes est notée $h\nu_{12}$.

que la longueur d'onde thermique $\lambda_T \simeq 4500a_0$. Le temps moyen entre collisions latérales est $\tau \sim 10$ ms, ce qui implique que $\omega_{ax}\tau \sim 0.5$.

En utilisant la technique des franges de Ramsey, l'équipe de Cornell au JILA a mesuré la différence d'énergie entre les deux états internes $h\nu_{12}$ en fonction de la position le long de l'axe Ox , voir Fig. 2.3. Deux effets contribuent à cette dépendance. Premièrement, l'effet Zeeman ressentit par chaque état interne n'est pas le même (effet Zeeman différentiel) et comme le champ magnétique dépend de la position, puisqu'il assure le piégeage harmonique des atomes, l'effet Zeeman différentiel dépend de x . Cet effet donne une différence en énergie de la forme suivante [2] :

$$\begin{aligned} \Delta E_{Zeeman} &\propto x^2 \text{ si } B_{bias} = 3.23 \text{ G} \\ \Delta E_{Zeeman} &\propto x^4 \text{ si } |B_{bias} - 3.23 \text{ G}| > 0.02 \text{ G} \end{aligned} \quad (2.1)$$

où B_{bias} est un champ magnétique de biais (valeur minimale du champ magnétique, au centre du piège) réglable. ΔE_{Zeeman} peut être positif ou négatif. Deuxièmement, le champ moyen ressentit par un atome dépend de son état interne car les trois longueurs de diffusion sont différentes. Une bonne approximation pour la différence en énergie due à cet effet est [2] :

$$\Delta E_{mf}(\mathbf{r}) \simeq -(g_{11} - g_{22})n(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

C'est une quantité négative. Ces deux effets (Zeeman différentiel et champ moyen différentiel) combinés permettent de contrôler la différence d'énergie entre les deux états internes $h\nu_{12} = h\nu_0 + \Delta E_{Zeeman} + \Delta E_{mf}$ en jouant sur B_{bias} ; $\nu_0 \sim 6.8$ GHz est la différence d'énergie pour un atome seul en l'absence de champ magnétique.

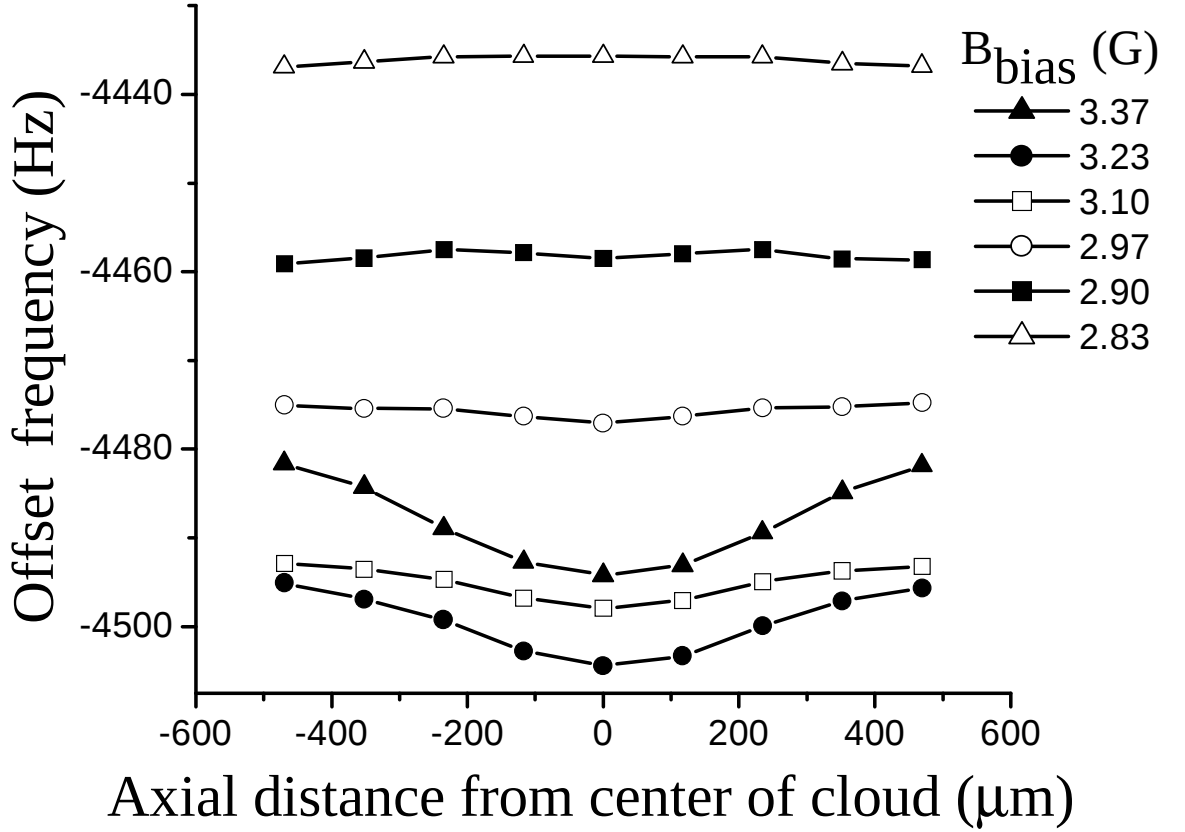


FIG. 2.3 – Mesure de la différence d'énergie entre les deux états internes ("offset frequency") $\nu_{12} - \nu_0$ (en Hz) en fonction de x , la distance au centre du piège (en μm), pour différentes valeurs du champ magnétique de biais B_{bias} (en G). A 3.23 G, l'effet Zeeman différentiel est négligeable et l'effet du champ moyen différentiel explique que ν_{12} soit une Gaussienne inversée. A 2.83 G, l'inhomogénéité due au champ moyen est presque exactement compensée par l'inhomogénéité du champ magnétique : ν_{12} est uniforme. La figure est extraite de la Réf. [2].

L'allure de la courbe $\nu_{12}(x)$ est typiquement celle d'une Gaussienne inversée à cause de la contribution ΔE_{mf} , voir la Fig. 2.3. Une mesure de la courbure moyenne de $\nu_{12}(x)$ est définie dans la Réf. [2] par :

$$\nu_{diff} \equiv \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{m} \times \left\langle \frac{d^2 \nu_{12}}{dx^2} \right\rangle} \quad (2.3)$$

Cette définition est utilisée dans la légende des courbes de la Fig. 2.4.

L'expérience proprement dite consiste en la procédure suivante. Initialement le gaz est composé d'atomes tous dans l'état interne $|1\rangle$. Il est à l'équilibre dans le piège. Une impulsion ("pulse" en anglais) radio-fréquence $\pi/2$ transfère soudainement chaque atome dans la même superposition linéaire à amplitudes égales des deux états internes. Cet instant est choisi comme le temps $t = 0$. L'évolution ultérieure du système vers l'équilibre est étudiée en mesurant la densité locale d'atomes dans l'état interne $|1\rangle$ ou $|2\rangle$ en fonction du temps t .

Il est observé, voir Fig. 2.4, que le système se sépare entre atomes dans l'état $|1\rangle$ et atomes dans l'état $|2\rangle$: 100 ms après l'impulsion $\pi/2$, les atomes dans l'état $|1\rangle$ (respectivement $|2\rangle$) sont essentiellement détectés loin (resp. proche) du centre du piège le long de l'axe du cigare. La densité totale locale $n = n_1 + n_2$ n'évolue pas et reste toujours à l'équilibre. Après environ 200 ms les densités locales d'atomes dans l'état $|1\rangle$ et dans l'état $|2\rangle$ sont à nouveau égales et à l'équilibre, comme immédiatement après l'impulsion $\pi/2$, à $t = 0^+$. C'est le phénomène de "séparation transitoire des états de spin".

A la suite de cette expérience dont le mécanisme n'est pas compris [2], l'explication théorique a été fournie simultanément par trois équipes [4, 27, 5]. Nous détaillons cette théorie dans le paragraphe suivant.

2.3 Théorie cinétique

Nous reprenons dans cette partie les résultats de la Réf. [27] et commençons par une discussion qualitative du mécanisme à l'origine de la séparation des états de spin. La différence d'énergie entre les deux états internes ν_{12} joue le rôle d'un champ magnétique effectif pour le pseudo-spin 1/2 associé aux deux états internes. Comme ce champ magnétique effectif dépend de la position le long de l'axe du piège, le gaz développe, à partir de $t > 0$, un gradient spatial de polarisation transverse de spin : des corrélations sont créées entre la position le long de l'axe et la polarisation transverse. Le mouvement individuel des atomes dans le piège crée des corrélations entre la vitesse et la polarisation transverse. Ainsi, une particule se déplaçant à une certaine vitesse au point x a une polarisation de spin qui n'est pas parallèle à la moyenne locale de la polarisation de spin en x . L'effet de rotation des spins identiques (ISRE) implique alors que la polarisation de spin quitte le plan transverse, créant une composante longitudinale différente de zéro. L'apparition de cette composante signale le début d'une conversion interne, ou

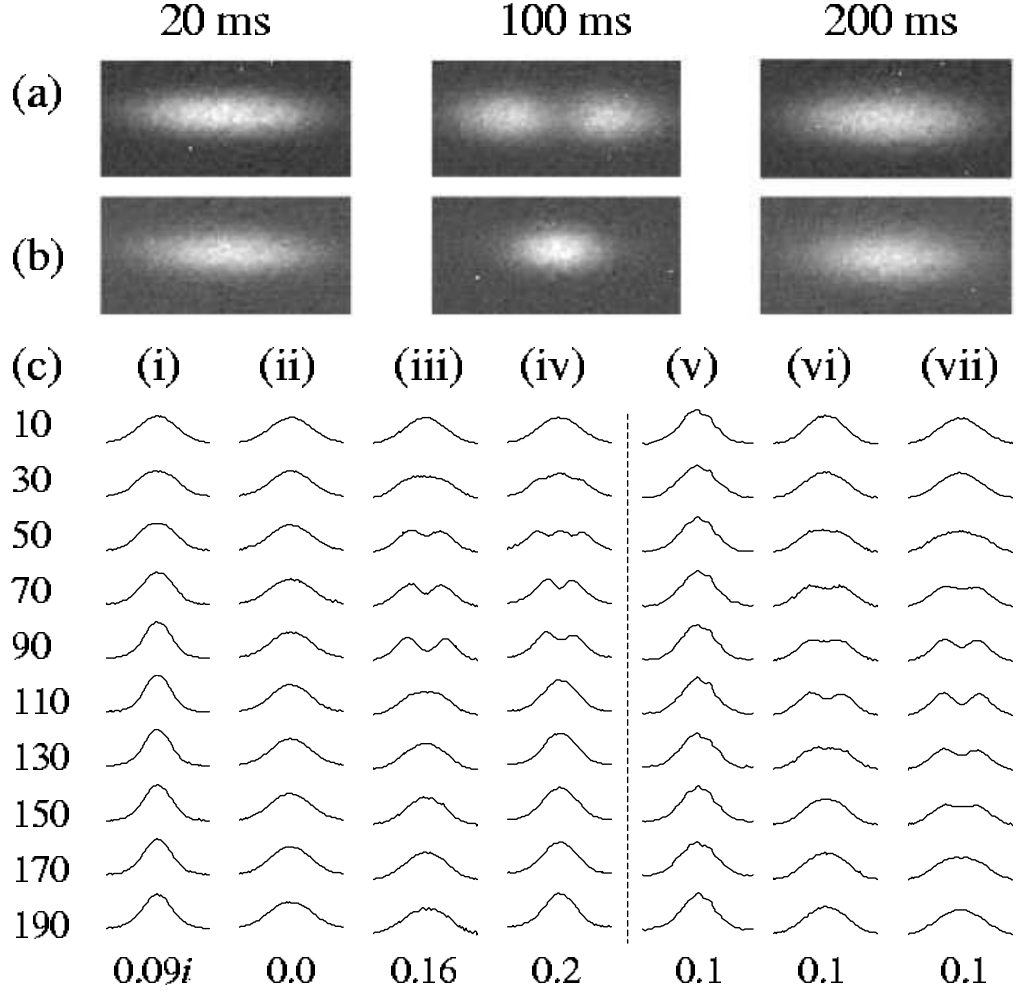


FIG. 2.4 – (a) Séparation des états de spin observée dans la distribution spatiale des atomes dans l'état $|1\rangle$ à différents temps (en ms) après l'impulsion $\pi/2$. (b) Idem pour l'état $|2\rangle$. (c) Profil de densité axial des atomes dans l'état $|1\rangle$ pour différents temps (en ms, dans la colonne de gauche) après l'impulsion $\pi/2$. Les valeurs de ν_{diff} (en Hz) sont indiquées sous chaque colonne. Les colonnes (i) à (iv) correspondent à une densité au centre $n(0) = 1.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Les colonnes (v) à (vii) correspondent à $\nu_{diff} = 0.1 \text{ Hz}$ et à une densité au centre qui augmente de (v) à (vii), $n(0) = 0.25; 1.2; 2.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. La figure est extraite de la Réf. [2].

autrement dit, de la séparation des états de spin. Nous précisons que la séparation apparente des états de spin n'est pas due à la séparation spatiale des atomes dans des états internes donnés, comme c'est par exemple le cas pour la séparation de deux espèces chimiques différentes. Au contraire, sans changer la position spatiale des atomes, l'ISRE transfère les atomes dans des états internes qui dépendent de leur position. Il serait donc plus correct de parler de "conversion interne". Nous continuons néanmoins à utiliser le terme de "séparation des états de spin".

Pour étudier ce phénomène quantitativement, nous allons utiliser l'équation cinétique (1.56) démontrée dans le premier chapitre. Nous la rappelons ici :

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} &\simeq -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \\ \partial_t \mathbf{M} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \frac{2\mathbf{U}}{\hbar} \times \mathbf{M} &\simeq -\frac{\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq}}{\tau} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Comme le piège en forme de cigare a une fréquence de piégeage axiale $\omega_{ax}/2\pi = 7$ Hz beaucoup plus petite que la fréquence de piégeage radiale $\omega_{rad}/2\pi = 230$ Hz, la dynamique du système est essentiellement unidimensionnelle (1D) le long de l'axe $\mathcal{O}x$. En supposant que l'équilibre local dans les directions radiales $\mathcal{O}yz$ est rapidement établi, nous pouvons moyenner l'équation cinétique (2.4) sur les coordonnées et les impulsions radiales. Nous définissons :

$$\hat{\rho}(x, p, t) \equiv \int dp_y dp_z \int dy dz \hat{\rho}(x, y, z, p, p_y, p_z, t) \quad (2.5)$$

ainsi que les grandeurs correspondantes que sont la densité dans l'espace de phase $f(x, p, t)$ et de la densité de polarisation $\mathbf{M}(x, p, t)$. L'équation cinétique effective 1D s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{p}{m} \partial_x f - \partial_x U_0 \partial_p f - \partial_x \mathbf{U} \cdot \partial_p \mathbf{M} &\simeq -(f - f^{eq})/\tau \\ \partial_t \mathbf{M} + \frac{p}{m} \partial_x \mathbf{M} - \partial_x U_0 \partial_p \mathbf{M} - \partial_x \mathbf{U} \partial_p f - \frac{2\mathbf{U}}{\hbar} \times \mathbf{M} &\simeq -(\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq})/\tau \end{aligned} \quad (2.6)$$

où le potentiel de piégeage effectif 1D est :

$$\begin{aligned} U_0(x, t) &= \frac{V_2^{ext} + V_1^{ext}}{2} + \left[\frac{1 + \epsilon}{2} (g_{22} + g_{11}) + g_{12} \right] \frac{n}{4} \\ &\quad + \frac{1 + \epsilon}{2} (g_{22} - g_{11}) \frac{m_{\parallel}}{4} \end{aligned} \quad (2.7)$$

et le champ magnétique effectif 1D est :

$$\mathbf{U}(x, t) = \frac{\hbar \Omega(x, t)}{2} \mathbf{e}_{\parallel} + \epsilon \frac{g_{12} \mathbf{m}(x, t)}{4} \quad (2.8)$$

avec :

$$\hbar\Omega(x, t) = V_2^{ext} - V_1^{ext} + \frac{1+\epsilon}{2} \left[(g_{22} - g_{11})\frac{n}{2} + (g_{22} + g_{11} - 2g_{12})\frac{m_{\parallel}}{2} \right]$$

où $\mathbf{e}_{\parallel}$ est le vecteur unité dans la direction longitudinale. Lors de la procédure de moyennage sur les coordonnées et les impulsions transverses, les constantes de couplage $g_{\alpha\beta}$ sont renormalisées d'un facteur $1/2$ [71] (comparer les équations précédentes aux équations tridimensionnelles (1.50) et (1.51)).

Quelques hypothèses simplificatrices sont appropriées pour décrire la situation expérimentale de l'expérience du JILA [2]. L'énergie de confinement magnétique $(V_2^{ext} + V_1^{ext})/2$ est de l'ordre $k_B T \simeq 13 \text{ kHz} \times h$, ce qui est beaucoup plus grand que l'énergie d'interaction de champ moyen $gn(0) \simeq 140 \text{ Hz} \times h$. Ceci permet de ne garder que l'énergie de confinement magnétique dans le potentiel de piégeage effectif U_0 :

$$U_0(x) \simeq \frac{V_1^{ext}(x) + V_2^{ext}(x)}{2} = \frac{1}{2} m \omega_{ax}^2 x^2 \quad (2.9)$$

L'énergie différentielle de piégeage $V_1 - V_2 \sim 10 \text{ Hz} \times h$ est encore plus petite que celle d'interaction de champ moyen. Ceci montre que les termes de force proportionnels à $\partial_x \mathbf{U} \cdot \partial_p(f \text{ ou } \mathbf{M})$, dans l'équation (2.6), sont négligeables. Par contre, lorsque le champ magnétique effectif $\mathbf{U}$ n'apparaît pas sous un gradient spatial, comme dans le terme $2\mathbf{U} \times \mathbf{M}/\hbar$, il ne peut être négligé. Le champ magnétique effectif $\mathbf{U}$ contient deux termes (voir l'équation (2.8)) : l'un est un champ magnétique effectif *externe* $\hbar\Omega/2$; l'autre est un champ magnétique *d'échange* ou champ moyen de spin $\epsilon g_{12} \mathbf{m}/4$ qui résulte de l'ISRE. Le champ magnétique externe est lui même la somme d'une contribution de l'effet Zeeman différentiel et d'une contribution de champ moyen différentiel :

$$\hbar\Omega(x) = \hbar\Omega(x)\mathbf{e}_{\parallel} \simeq [V_2^{ext}(x) - V_1^{ext}(x) + (g_{22} - g_{11})n(x)/2]\mathbf{e}_{\parallel} \quad (2.10)$$

où, suivant la Réf. [2], nous avons utilisé la relation $2g_{12} \simeq g_{11} + g_{22}$ valable pour le ^{87}Rb et où $\epsilon = 1$ pour des bosons. La valeur moyenne sur l'échantillon du champ magnétique effectif $\Omega(x) = \Omega(x)\mathbf{e}_{\parallel}$ est soustraite en passant dans le référentiel tournant (référentiel de Larmor). Pour faire le lien avec les notations utilisées dans la description de l'expérience du JILA (équations (2.1) et (2.2)), nous remarquons que :

$$\hbar\Omega = \hbar\nu_{12} - \hbar\nu_0 = \Delta E_{Zeeman} + \Delta E_{mf} \quad (2.11)$$

et

$$\begin{aligned} \Delta E_{Zeeman}(x) &= V_2^{ext}(x) - V_1^{ext}(x) \\ \Delta E_{mf}(x) &\simeq -(g_{11} - g_{22})n(x)/2 \end{aligned} \quad (2.12)$$

où la dernière équation est obtenue grâce à la relation particulière des constantes de couplage dans le cas du ^{87}Rb . Le facteur $1/2$ de différence entre l'expression

de ΔE_{mf} donnée ici et celle du chapitre précédent, équation (2.2), provient de la moyenne radiale qui renormalise les constantes de couplage de ce facteur [71].

Guidés par les données expérimentales, nous choisissons une dépendance Gaussienne du champ magnétique effectif :

$$\Omega(x) \simeq -\delta\Omega \exp -(m\omega_{ax}^2 x^2 / 2k_B T) \quad (2.13)$$

Le paramètre $\delta\Omega$ est la différence entre $\Omega(x)$ au centre et au bord du nuage d'atomes. C'est également la courbure du champ magnétique effectif au centre du piège. Cette quantité est donc reliée à ν_{diff} défini dans la Réf. [2]. La relation entre $\delta\Omega$ et ν_{diff} dépend de la variation spatiale mesurée de $\Omega(x)$. Une formule approchée est :

$$\delta\Omega / 2\pi \sim \frac{4\pi k_B T}{\hbar \omega_{ax}^2} \nu_{diff}^2 \sim 500 \text{ Hz}^{-1} \times \nu_{diff}^2 \quad (2.14)$$

Nous aboutissons finalement à l'équation cinétique effective à 1D suivante :

$$\partial_t f + \frac{p}{m} \partial_x f - m\omega_{ax}^2 x \partial_p f \simeq -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{M} + \frac{p}{m} \partial_x \mathbf{M} - m\omega_{ax}^2 x \partial_p \mathbf{M} - \left(\Omega + \frac{g_{12} \mathbf{m}}{2\hbar} \right) \times \mathbf{M} \\ \simeq -\frac{\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq}}{\tau} \end{aligned} \quad (2.16)$$

L'équation précédente montre que le paramètre sans dimension caractérisant l'importance de l'ISRE est :

$$\mu \equiv \frac{g_{12} n(0) \tau}{\hbar} \sim \frac{g_{12} n(0)}{2\hbar \omega_{ax}} \simeq 10 \quad (2.17)$$

On remarque que $\mu \sim \lambda_T / a_{12}$, comme discuté dans le paragraphe sur l'ISRE.

La distribution dans l'espace de phase à $t = 0^+$, immédiatement après l'impulsion $\pi/2$, est

$$\begin{aligned} f_{MB}(x, p) &= \frac{Nm\omega_{rad}^2}{(2\pi)^2 k_B T} \frac{1}{x_T p_T} e^{-p^2/2p_T^2 - x^2/2x_T^2} \\ \mathbf{M}(x, p, t=0) &= f_{MB}(x, p) \mathbf{e}_{\perp,1} \end{aligned} \quad (2.18)$$

où $x_T \equiv \sqrt{k_B T / m\omega_{ax}^2}$ et $p_T \equiv \sqrt{mk_B T}$. La densité dans l'espace de phase initiale f_{MB} est normalisée pour donner le nombre total d'atomes N lorsqu'elle est intégrée sur x et p . Elle résout l'équation cinétique (2.15) et n'évolue donc pas dans le temps. Ceci implique que la densité totale est également une constante et que le profil est $n(x) = n(0) \exp(-x^2/2x_T^2)$, ce qui justifie a posteriori le choix d'une Gaussienne pour modéliser la dépendance spatiale du champ magnétique effectif $\Omega(x)$. A partir de maintenant, nous étudions uniquement la densité de polarisation dans l'espace de phase $\mathbf{M}(x, p, t)$ et son équation cinétique (2.16).

Nous pouvons trouver une solution analytique à cette équation pour les temps t petit devant τ , i.e. lorsqu'on peut négliger l'intégrale de collision. On suppose qu'on peut développer $\mathbf{M}(x, p, t)$ en série de Taylor du temps t :

$$\mathbf{M}(x, p, t) = \mathbf{M}^{(0)}(x, p) + \mathbf{M}^{(1)}(x, p)t + \mathbf{M}^{(2)}(x, p)t^2/2 + \dots \quad (2.19)$$

et on résout l'équation cinétique (2.16) à chaque ordre. Le résultat implique que la polarisation longitudinale, i.e. la différence locale de population des deux états internes, démarre comme t^4 :

$$\frac{m_{\parallel}(x, t)}{n(x)} = \frac{n_2(x) - n_1(x)}{n(x)} = \frac{\epsilon g_{12} n(x)}{\hbar \omega_{ax}} \frac{\Omega''(x) x_T^2 - 2\Omega'(x)x}{\omega_{ax}} \frac{(\omega_{ax} t)^4}{48} \quad (2.20)$$

où $\Omega'(x)$ et $\Omega''(x)$ sont les dérivées premières et secondes de $\Omega(x)$ par rapport à x . Le premier facteur dans le membre de droite de l'équation précédente est le paramètre ISRE μ . Comme sa valeur pour l'expérience de JILA est de l'ordre ~ 10 , il n'est pas étonnant qu'on puisse observer une séparation des états de spin en un temps plus petit que la période axiale du piège. Le deuxième facteur fait apparaître les variations spatiales du champ magnétique effectif $\Omega(x)$. En l'absence de courbure ($\delta\Omega = 0$), le phénomène ne se produit donc pas. Si on utilise les paramètres expérimentaux de la Réf. [2], on voit qu'une séparation significative des états de spin ($m_{\parallel} \sim n$) se produit au bout de ~ 25 ms, à comparer à 30–50 ms expérimentalement.

Pour obtenir la solution de l'équation cinétique quelque soit le temps t , nous utilisons une méthode numérique. Nous avons écrit un programme qui propage la distribution initiale dans le temps en suivant la méthode de Lax-Wendroff [72]. Les résultats numériques sont présentés dans les Fig. 2.5 et 2.6. La première figure représente l'évolution temporelle des trois composantes de la polarisation de spin au centre du piège, sans paramètre ajustable. La polarisation longitudinale démarre comme prédit par l'équation (2.20), atteint son maximum vers 90 ms, puis oscille et décroît vers zéro après 300 ms. Nous étudions le maximum du phénomène et sa relaxation vers l'équilibre dans le paragraphe 2.5.

La Fig. 2.6 représente l'évolution de la densité n_1 d'atomes dans l'état $|1\rangle$ comme fonction de $\delta\Omega/2\pi$ et de μ . Pour comparer ce résultat à la courbe expérimentale Fig. 2.4 extraite de la Réf. [2], nous donnons les équivalences approximatives suivantes entre ν_{diff} et $\delta\Omega/2\pi$ calculées avec la formule (2.14) :

ν_{diff} (Hz)	$\delta\Omega/2\pi$ (Hz)
$i \times 0.09$	−4
0	0
0.16	12
0.2	20

Lorsque la courbure $\delta\Omega$ est nulle (colonne (b)), la séparation ne se produit pas. Les colonnes (a) et (c) montrent l'effet de la séparation des états de spin pour

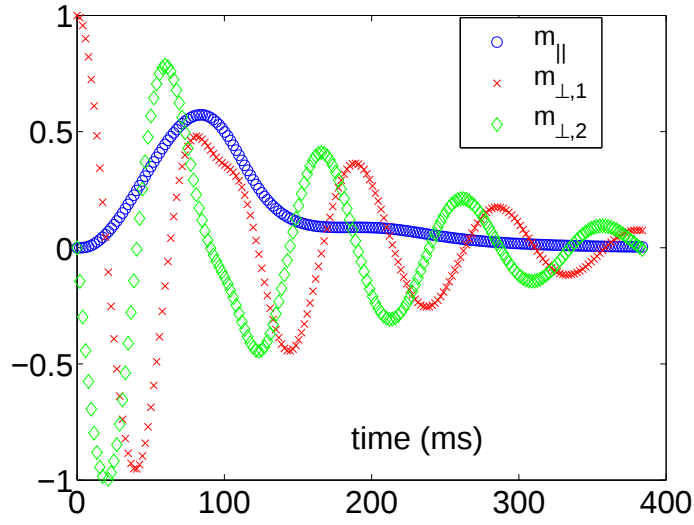


FIG. 2.5 – Evolution temporelle de la polarisation de spin $\mathbf{m}$ au centre du piège ; $m_{\parallel}$ correspond à la différence de population entre les deux états internes ; $m_{\perp,1}$ et $m_{\perp,2}$ sont les deux composantes transverses de la polarisation de spin. La courbure du champ magnétique effectif au centre du piège $\delta\Omega/2\pi = 12$ Hz.

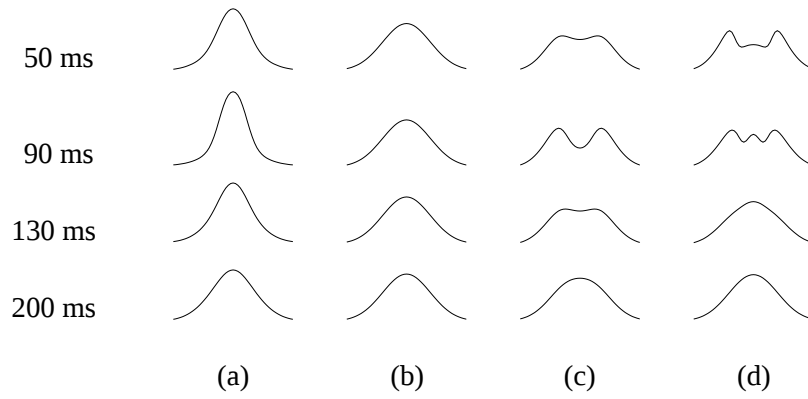


FIG. 2.6 – Evolution de la densité d'atomes dans l'état $|1\rangle$; $\delta\Omega/2\pi$ et μ valent (a) -12 Hz, 10 (b) 0 Hz, 10 (c) 12 Hz, 10 (d) 30 Hz, 15.

des courbures positives et négatives. Pour une courbure négative, les atomes dans l'état interne $|1\rangle$ se rapprochent du centre du piège, alors que pour une courbure positive ils s'en éloignent. La colonne (d) à $t = 90$ ms montre ce que les auteurs de la Réf. [2] appellent des “effets d'ordre supérieur”, qui se produisent pour des valeurs suffisamment importantes de la courbure $\delta\Omega$ et du paramètre ISRE μ . Cette figure reproduit correctement les résultats expérimentaux de la Fig. 2.4. Nous remarquons néanmoins que pour voir les “effets d'ordre supérieur”, nous sommes obligés de prendre une valeur de la courbure au centre plus grande que la valeur expérimentale. Ceci n'est pas nécessaire, si nous faisons les deux modifications suivantes [73, 5] : le champ magnétique externe $\Omega(x)$ n'est pas supposé Gaussien mais pris sous forme numérique à partir des mesures expérimentales, et le temps de relaxation τ est supposé dépendre de la position proportionnellement à l'inverse de la densité locale :

$$\tau(x) \sim \frac{1}{4\pi a_{12}^2 n(x) v_T} \quad (2.21)$$

A l'heure actuelle, il n'y a pas de réelle compréhension physique de ce choix de la dépendance spatiale pour le temps de relaxation [74]. Cependant, il semble mieux reproduire les données expérimentales qu'un temps de relaxation indépendant de la position.

2.4 Ondes de spin de grande amplitude, non-hydrodynamiques

Le phénomène de séparation des états de spin, discuté dans le paragraphe précédent, peut être vu comme la manifestation d'une onde de spin dans un gaz polarisé. Cette onde de spin a des caractéristiques différentes des ondes de spin habituellement observées dans les gaz polarisés [8, 9, 10]. Nous discutons ici de ces particularités.

Les ondes de spin observées dans les années 80 l'ont été sur des spins nucléaires [8, 9, 10]. Ces gaz sont polarisés soit par un champ magnétique externe intense – technique dite de “force brute” – soit par pompage optique. Il est extrêmement difficile d'atteindre une polarisation de 100% avec des spins nucléaires. Les ondes de spins usuelles sont des ondes transverses, c'est-à-dire que l'oscillation est perpendiculaire à la direction du champ magnétique externe ou de la polarisation initiale du gaz. Elles sont de petite amplitude et décrites par des équations hydrodynamiques. Elles ont surtout été étudiées dans le régime hydrodynamique, i.e. le régime dominé par les collisions, mais il existe également quelques travaux sur le régime sans collisions [75]. Nous revenons à présent sur l'hydrodynamique des spins à la base de leur description [7, 61, 68, 67].

A partir de l'équation cinétique (1.56), nous pouvons obtenir une hydrodynamique pour le transport de spin en supposant que la distribution dans l'espace de phase reste toujours proche de sa valeur d'équilibre local. Pour pouvoir discuter

l'expérience réalisée au JILA, nous démontrons les équations hydrodynamiques directement à partir de l'équation cinétique effective à 1D (2.16). Nous commençons par rappeler la définition de la polarisation locale de spin :

$$\mathbf{m}(x, t) \equiv \int dp \mathbf{M}(x, p, t) \quad (2.22)$$

et du courant de polarisation le long de l'axe $\mathcal{O}x$:

$$\mathbf{j}(x, t) \equiv \int dp \frac{p}{m} \mathbf{M}(x, p, t) \quad (2.23)$$

Ce sont les deux premiers moments de la distribution $\mathbf{M}(p)$. Nous postulons la forme suivante pour la densité de polarisation dans l'espace de phase :

$$\mathbf{M}(x, p, t) \simeq \mathbf{M}^{eq}(x, p, t) + f_{MB}(x, p) \frac{p}{k_B T n(x)} \mathbf{j}(x, t) \quad (2.24)$$

où

$$\mathbf{M}^{eq}(x, p, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \mathbf{m}(x, t) e^{-p^2/2p_T^2} \quad (2.25)$$

est la densité de polarisation dans l'espace de phase à l'équilibre local. L'équation (2.24) signifie que la distribution de polarisation dans l'espace de phase est égale à la distribution à l'équilibre local (ordre 0), plus une petite correction (ordre 1) qui est proportionnelle au courant de spin. C'est l'équivalent du premier ordre du développement de Chapman-Enskog de l'équation de Boltzmann (voir Réf. [44], par exemple). En introduisant (2.24) dans l'équation cinétique (2.16), nous obtenons un système fermé d'équations pour la polarisation $\mathbf{m}$ et le courant de polarisation $\mathbf{j}$:

$$\partial_t \mathbf{m} + \partial_x \mathbf{j} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{m} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{j} - \left(\boldsymbol{\Omega} + \frac{g_{12} \mathbf{m}}{2\hbar} \right) \times \mathbf{j} + \frac{k_B T}{m} \partial_x \mathbf{m} + \omega_{ax}^2 x \mathbf{m} \\ \simeq -\frac{\mathbf{j}}{\tau} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Ces équations sont les équations de l'hydrodynamique des spins pour un gaz polarisé non-dégénéré [7, 61, 68]. Elles sont équivalentes aux équations de Leggett d'un liquide de Fermi normal [67] et c'est pourquoi nous les appelons désormais "équations de Leggett". La première équation (2.26) est exacte, elle traduit la conservation de la polarisation de spin en présence d'un champ magnétique externe $\boldsymbol{\Omega}$. La deuxième équation (2.27) est approchée et donne l'évolution du courant de polarisation. Le deuxième terme du membre de gauche exprime la rotation du courant de polarisation autour du champ magnétique externe et du champ moyen de spin, le troisième terme représente la diffusion de spin (le coefficient de diffusion est $D \equiv k_B T \tau / m$) et le quatrième traduit l'influence du piégeage harmonique

des atomes. Le membre de droite de cette équation est non-nul car le courant de polarisation n'est pas conservé : c'est une variable rapide qui relaxe vers sa valeur d'équilibre local en un temps de l'ordre du temps moyen entre collisions τ . On note que les équations de Leggett (2.26, 2.27) sont équivalentes à l'hydrodynamique de Navier-Stokes pour un fluide sans spin, qui résulte d'un développement de Chapman-Enskog mené jusqu'au premier ordre (voir Réf. [44]).

Les équations de Leggett sont en fait valables plus généralement que ne le laisse penser la démonstration ci-dessus. Il suffit que la distribution de polarisation $\mathbf{M}(p)$ dans l'espace p soit proche de l'équilibre local et/ou de l'équilibre global [67]. On peut donc les utiliser dans le régime hydrodynamique (quelque soit l'amplitude des ondes) ou dans la limite de faibles oscillations quelque soit le régime (hydrodynamique, sans collision ou intermédiaire). Elles décrivent, par exemple, les ondes de spin dans le régime sans collision dans l' ^3He liquide – ondes de spin de Silin [76] – et dans l' $\text{H}\downarrow$ gazeux [75].

Les ondes de spin usuelles sont obtenues en linéarisant les équations de Leggett autour d'une solution stationnaire. Par exemple, en l'absence de gradient initial de la polarisation longitudinale $\mathbf{m}_{\parallel}^0$ et de piégeage axial, on obtient la relation de dispersion suivante pour les ondes de spin transverse polarisées circulairement :

$$\omega = \frac{Dk^2}{i + \mu m_{\parallel}^0 / 2n} \quad (2.28)$$

où ω est la pulsation du mode propre et k son vecteur d'onde. Les ondes de spin ont une dépendance quadratique en k car le champ moyen de spin apparaît à l'ordre zéro du développement en gradients et ne fait donc pas intervenir de gradient spatial². Le mode longitudinal est lui purement diffusif :

$$\omega = -iDk^2 \quad (2.29)$$

Nous revenons à présent aux ondes de spin observées dans l'expérience du JILA. Dans ce système, "l'atome à deux niveaux" joue le rôle du spin 1/2. Il est beaucoup plus facile d'obtenir des polarisations très fortes dans ce système. Ainsi, la polarisation avant l'impulsion $\pi/2$ est longitudinale, car tous les atomes sont dans l'état $|1\rangle$, i.e. qu'elle est de 100%. L'impulsion $\pi/2$ bascule la polarisation dans le plan transverse. Le phénomène de séparation des états de spin (voir Fig. 2.5) correspond à l'apparition d'une polarisation longitudinale très grande qui atteint un maximum puis décroît vers zéro de manière quasi-monotone. Il s'agit d'une onde de spin longitudinale non-linéaire de grande amplitude. De plus, l'expérience du JILA est réalisée dans un régime où $\omega_{ax}\tau \sim 1$, c'est-à-dire un régime intermédiaire, ni hydrodynamique ($\omega_{ax}\tau \ll 1$), ni sans collisions ($\omega_{ax}\tau \gg 1$). Il n'y a donc pas, a

²Le champ moyen de son zéro apparaît lui sous un gradient spatial et les modes collectifs qu'il crée – le son zéro dans un liquide de Fermi, par exemple – ont une relation de dispersion linéaire en k .

priori, de raison de faire confiance aux équations de Leggett. C'est en ce sens que nous parlons d'ondes de spin de grande amplitude, non-hydrodynamiques.

Nous utilisons maintenant l'équation cinétique (2.16), et sa solution numérique, pour étudier la validité des équations de Leggett pour décrire la séparation des états de spin. La Fig. 2.7 montre l'évolution temporelle de la distribution de polarisation longitudinale et transverse dans l'espace p . Pour comparaison est également représentée la distribution de polarisation à l'équilibre local (ligne en tirets).

On observe que pour $t \lesssim 40$ ms, la distribution de polarisation transverse est proche de l'équilibre local et la distribution de polarisation longitudinale est proche de l'équilibre global. Les équations de Leggett sont donc valables. Pour $t \gtrsim 40$ ms, la distribution de polarisation est loin de l'équilibre global et local. On ne peut donc utiliser une description hydrodynamique dans ce cas et il faut avoir recours à l'équation cinétique, c'est-à-dire garder toute la dépendance en impulsion p de la distribution. Finalement, pour $t \gtrsim 160$ ms (fin de la séparation des états de spin) l'équilibre est presque atteint et les équations de Leggett sont à nouveau valables. Ceci montre que le phénomène de séparation des états de spin observé au JILA est plus proche, lorsqu'on le compare à des oscillations de densité, d'une onde de choc que d'une onde sonore usuelle. La distribution dans l'espace p se déforme fortement et étudier les deux premiers moments de la distribution, $\mathbf{m}$ et $\mathbf{j}$, n'est pas équivalent à étudier toute la distribution $\mathbf{M}(p)$.

Le début de la séparation des états de spin peut être traité analytiquement dans diverses approximations. Ceci va nous permettre de comparer les différentes approches théoriques des Réfs. [4, 27, 5]. Nous rappelons le résultat obtenu précédemment (2.20), dans le cas où l'on utilise l'équation cinétique (2.16). Pour $t \ll \tau$:

$$\frac{m_{\parallel}(x, t)}{n(x)} = \frac{g_{12}n(x)}{2\hbar} \left[\frac{k_B T}{m} \Omega''(x) - 2\omega_{ax}^2 x \Omega'(x) \right] \frac{t^4}{4!} \quad (2.30)$$

où on s'est servi de la définition de $x_T = \sqrt{k_B T / m\omega_{ax}^2}$.

Une deuxième approche possible consiste à utiliser les équations de Leggett, qui sont valables pour $t \ll \tau$ – voir plus haut. Williams et al. [5] les ont résolues analytiquement et ont ainsi réobtenu le résultat (2.20).

Une troisième façon d'aborder le problème est, suivant Oktel et Levitov [4], de recourir aux équations de Leggett dans l'approximation hydrodynamique, dont le domaine de validité est $\omega_{ax}\tau \ll 1$. Cette approximation consiste à supposer que le courant de polarisation de spin est en permanence très proche de sa valeur stationnaire. Il s'agit, en effet, d'une variable rapide qui relaxe vers sa valeur stationnaire en environ un temps entre collisions. Cette hypothèse permet de négliger le terme $\partial_t \mathbf{j}$ dans l'équation (2.27). Nous avons alors obtenu le comportement suivant pour les “petits temps” :

$$\frac{m_{\parallel}(x, t)}{n(x)} \sim \frac{g_{12}n(x)}{2\hbar} \left[\frac{k_B T}{m} \Omega''(x) - 2\omega_{ax}^2 x \Omega'(x) \right] \frac{(\tau t)^2}{4!} \quad (2.31)$$

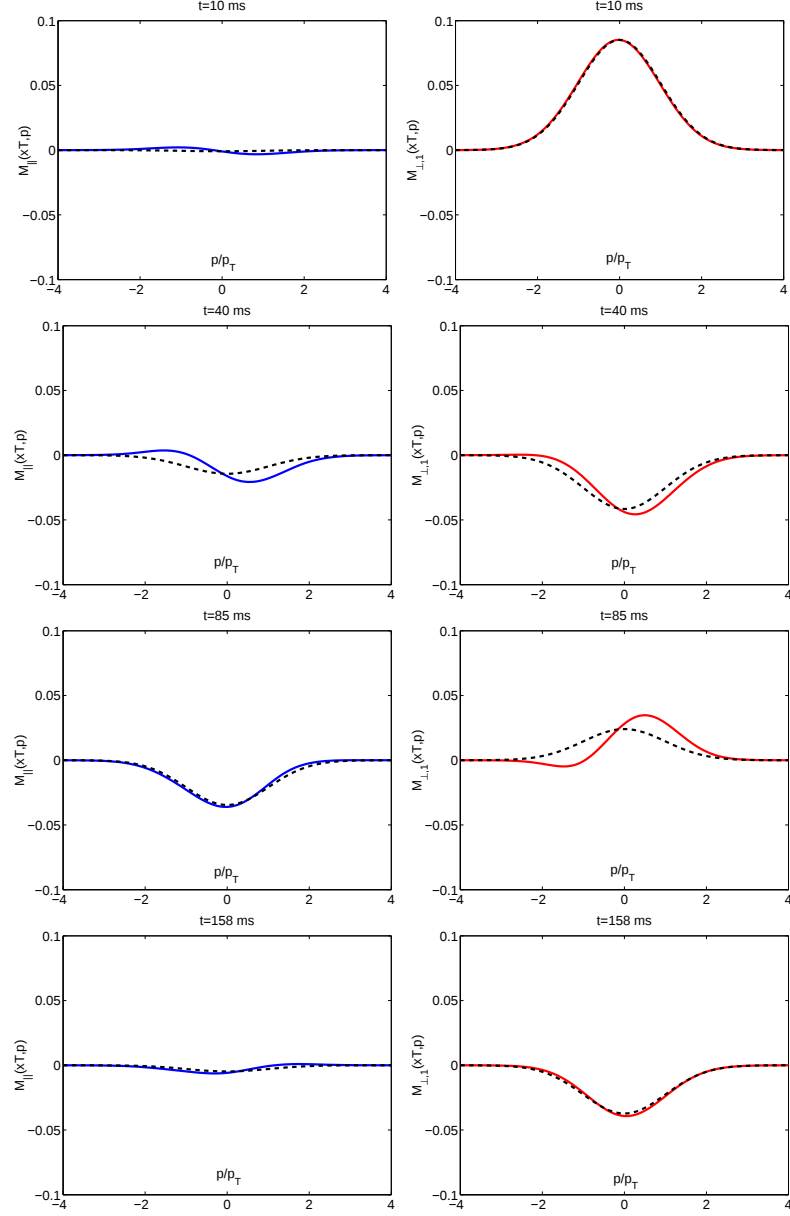


FIG. 2.7 – Distribution de polarisation longitudinale $M_{||}(x = x_T, p, t)$ et transverse $M_{\perp,1}(x = x_T, p, t)$ en $x = x_T = \sqrt{k_B T / m \omega_{ax}^2}$ pour les temps $t = 10; 40; 85; 160$ ms. La distribution de polarisation à l'équilibre est représentée par des tirets.

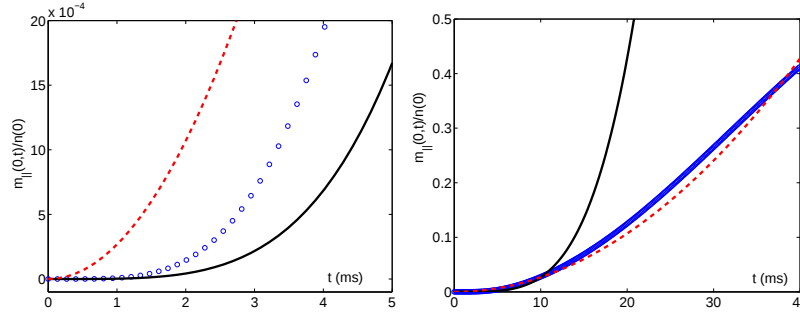


FIG. 2.8 – Début de la séparation des états de spin au centre du piège. La simulation numérique de l'équation cinétique est représentée par des cercles, la loi en t^4 avec une ligne pleine et la loi en t^2 avec une ligne tiretée.

Cette équation prédit un comportement différent des autres approches et montre clairement le rôle de l'approximation hydrodynamique : t^4 est remplacé par $(t\tau)^2$. Les temps plus courts qu'un temps entre collisions τ ne sont pas traités dans cette approximation. Les lois en t^4 et en t^2 sont représentées dans la Fig. 2.8. On constate que le démarrage est bien en t^4 .

Lorsque $t > \tau \simeq 10$ ms, les équations de Leggett dans l'approximation hydrodynamique peuvent être utilisées. Il faut néanmoins tenir compte du fait que ce qui se passe avant un temps entre collisions n'est pas décrit dans l'approximation hydrodynamique. Un comportement correct est obtenu en faisant le remplacement $t \rightarrow t - t_0$ dans l'équation (2.31), où t_0 est de l'ordre du temps entre collisions τ . Alors, pour $t > 10$ ms :

$$\frac{m_{||}(x, t)}{n(x)} \propto (t - t_0)^2 \quad (2.32)$$

Ce comportement est représenté dans la Fig. 2.9. Il reproduit correctement la solution numérique de l'équation cinétique pour $\tau \simeq 10 < t$, mais pas après ~ 40 ms. En effet, après 40 ms, la distribution $\mathbf{M}(p)$ est très déformée et les équations de Leggett ne sont plus valables.

En conclusion, la séparation des états de spin peut être vue comme la manifestation d'ondes de spin longitudinales, de grande amplitude, non-hydrodynamiques. Leur étude quantitative nécessite l'utilisation d'une équation cinétique ; les équations de Leggett ne sont pas suffisantes.

2.5 Décroissance du phénomène

Jusqu'à présent, nous avons essentiellement étudié le début du phénomène, lorsque l'amplitude de l'onde de spin croît et que les deux états internes se séparent. Nous discutons à présent sa fin, lorsque les oscillations de spin décroissent et que, finalement, le système retourne à l'équilibre.

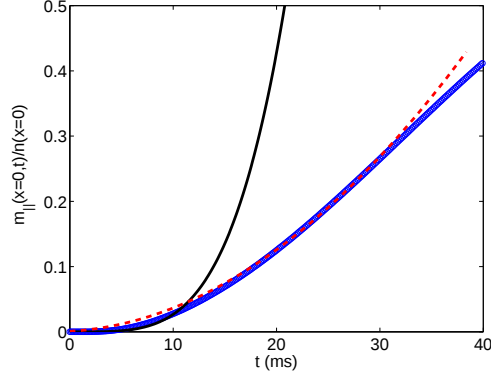


FIG. 2.9 – La simulation numérique est représentée par des cercles, la loi en t^4 par un trait plein et la loi en $(t - t_0)^2$ avec des tirets. On remarque le bon accord entre la loi en $(t - t_0)^2$, avec $t_0 = 2$ ms, et l'équation cinétique dans l'intervalle $\tau \simeq 10 < t \lesssim 40$ ms.

Il est relativement facile d'obtenir l'ordre de grandeur du temps auquel la transition entre les deux régimes se produit, i.e. le temps auquel le maximum de la séparation est atteint. Nous avons vu que pour les temps courts, la séparation est une conséquence indirecte de la précession différentielle de la polarisation transverse en différents points le long de l'axe Ox du piège ; le mouvement thermique des atomes crée des corrélations entre l'orientation transverse des spins et le signe de la composante x de la vitesse. Pour des temps plus longs, la rotation différentielle des spins est tellement grande que chaque signe de cette vitesse est associé à un large éventail d'orientations transverses, de moyenne nulle. Clairement, l'effet de conversion interne sélective se moyenne alors quasiment à zéro. Pour obtenir un ordre de grandeur du temps du maximum, nous considérons la situation simple d'un gaz homogène dans une boîte de longueur L dans laquelle existe un gradient linéaire de champ magnétique effectif externe Ω' . Nous étudions la situation au centre de la boîte. Au temps t , les atomes initialement en $x = v \times t$, atteignent le centre avec une polarisation transverse qui a tourné d'un angle :

$$\Omega' \times x \times t = \Omega' v t^2 \quad (2.33)$$

Ainsi, pour des temps plus grands que

$$t_m \sim \frac{1}{\sqrt{\Omega' v}} \quad (2.34)$$

les orientations transverses des spins se moyennent de telle sorte que l'effet de ségrégation apparente s'arrête. Dans le cas du gaz piégé, $\Omega' \sim \delta\Omega/L$ et $v \sim \omega_{ax}L$ où L est la taille du nuage et nous obtenons :

$$t_m \sim \frac{2\pi}{\sqrt{\delta\Omega \omega_{ax}}} \quad (2.35)$$

Des valeurs typiques donnent $t_m \sim 100$ ms en accord avec la solution numérique de l'équation cinétique. Après ce maximum, le système tend à retourner vers l'équilibre durant un intervalle de temps que nous appelons la décroissance du phénomène.

Comme le montre la Fig. 2.5, la décroissance de la polarisation longitudinale est différente de celle des polarisations transverses. Nous commençons par discuter de la polarisation longitudinale $m_{\parallel}(x, t)$. Elle retourne à l'équilibre en deux étapes : premièrement, elle décroît rapidement de sa valeur maximale à presque zéro en un temps de l'ordre de 50 ms ; deuxièmement, elle va lentement à zéro en un temps de l'ordre de 200 ms. Pour comprendre ces comportements, nous remarquons que la Fig. 2.5 montre qu'au maximum de la séparation, les paquets d'onde (ou les nuages) associés à chaque état interne ne se recouvrent plus que faiblement. Le système est alors quasiment équivalent à deux gaz classiques dans un piège. La première étape est alors facilement interprétée comme étant le mouvement libre des deux nuages sous l'effet de la force de rappel du piège. Il faut environ un quart de période $T_{ax}/4 = \pi/2\omega_{ax} = 36$ ms pour aller du maximum de l'oscillation au centre du piège. En réalité, comme les deux nuages se recouvrent un peu, ils se repoussent par l'intermédiaire du champ moyen et il faut donc un peu plus qu'un quart de période pour atteindre la situation où les deux nuages se recouvrent significativement³. La deuxième étape commence lorsque les deux nuages se recouvrent réellement : l'évolution ultérieure du système s'interprète comme la diffusion mutuelle de deux gaz classiques⁴. Ceci se produit environ ~ 150 ms après l'impulsion $\pi/2$ initiale et peut donc se décrire à l'aide des équations de Leggett (puisque nous avons vérifié que le système est alors proche de l'équilibre local). Nous savons alors que les modes de spin longitudinaux sont purement diffusifs, voir l'équation (2.29). Le temps caractéristique de décroissance est donc donné par le temps de diffusion de spin $t_{diff} \sim L^2/D$, où $L \sim 2\sqrt{k_B T/m\omega_{ax}^2}$ est la taille du nuage et où $D = k_B T\tau/m$ est le coefficient de diffusion de spin. En utilisant les mêmes paramètres que pour la simulation numérique, nous trouvons que $t_{diff} \sim 200$ ms, en bon accord avec la solution numérique de l'équation cinétique.

Nous discutons à présent de la décroissance de la polarisation transverse $\mathbf{m}_{\perp}(x, t)$. Comme on le voit sur la Fig. 2.5, elle oscille de nombreuses fois avant de s'annuler. Après ~ 150 ms, lorsque la distribution dans l'espace p est proche de l'équilibre, l'oscillation de la polarisation transverse se produit dans le régime de

³Le fait que les deux nuages interagissent principalement par le champ moyen plutôt que par les collisions latérales est lié au régime $\omega_{ax}\tau \sim 1$ et est confirmé par la solution numérique de l'équation cinétique. En effet, nous avons vérifié numériquement qu'enlever l'intégrale de collision ne change pas le temps caractéristique de décroissance. Le rôle de l'intégrale de collision est simplement d'amortir les résurgences de l'oscillation des deux nuages l'un par rapport à l'autre que l'on observe en l'absence d'intégrale de collision.

⁴En réalité, une instabilité de la polarisation transverse est possible dans cette situation où existe un fort gradient de polarisation longitudinale et un champ moyen de spin important : c'est l'instabilité de Castaing [11]. Dans le chapitre suivant, nous vérifions qu'elle ne joue pas de rôle dans l'expérience réalisée au JILA [2].

validité des équations de Leggett. Ces équations prédisent des ondes de spin transverse amorties, voir l'équation (2.28). Le temps d'amortissement est de l'ordre du temps de diffusion de spin $t_{diff} \sim 200$ ms, ce qui est en accord avec la solution numérique de l'équation cinétique. La fréquence de ces ondes de spin est essentiellement donnée par la fréquence de précession dans le champ magnétique externe effectif, dont l'ordre de grandeur est $\delta\Omega/2\pi = 12$ Hz, voir la Fig.2.5.

2.6 Paquet d'onde “fantôme” et décohérence

Nous revenons à présent sur la situation au maximum de la séparation, où nous avons fait l'hypothèse que les deux nuages ne se recouvrent pas. Pour simplifier la discussion, nous supposons qu'il y a un nuage d'atomes correspondant à l'état 1 centré en $x = d/2$, et un nuage d'atomes correspondant à l'état 2 centré en $x = -d/2$, où d est la distance entre les centres des deux nuages⁵. On note δx la largeur de chacun des nuages ; elle est telle que $\delta x < d$. Si effectivement les deux nuages se séparent complètement, la mécanique quantique prédit que la polarisation transverse locale doit s'annuler en tout point x , car la densité de spin locale correspond à un opérateur local dans l'espace position. Ainsi, contrairement à ce que nous avons affirmé dans le paragraphe 2.5, le système n'est *pas* un mélange classique de deux gaz mais une superposition macroscopique cohérente des deux états internes.

On peut alors se demander comment se manifeste cette cohérence dans la distribution de Wigner. La réponse est bien connue [77] : la présence de la cohérence se manifeste par la présence de ce que l'on appelle le paquet d'onde “fantôme”. Il s'agit d'un paquet d'onde présent dans les composantes de spin transverses de la distribution de Wigner et centré en $(x = 0, p = 0)$. Il oscille très rapidement dans la direction parallèle à l'axe des impulsions, en passant par des valeurs positives et négatives. La période des oscillations est $2\pi\hbar/d$ (voir l'appendice 2.7), ce qui montre que le paquet “fantôme” oscille d'autant plus vite que les deux nuages sont éloignés. Le paquet d'onde “fantôme” existe lorsque le système est dans une superposition cohérente des états internes et disparaît lorsqu'il est dans un mélange statistique des états internes. Pour une discussion plus détaillée du paquet d'onde “fantôme”, voir l'appendice 2.7.

La question suivante est de savoir dans quelle mesure le paquet d'onde “fantôme” est préservé par l'évolution temporelle de l'équation cinétique. Comme le formalisme de la distribution de Wigner ne suppose aucune approximation en lui-même (il est strictement équivalent à l'utilisation des opérateurs), la question se pose car l'équation cinétique ne reproduit pas l'évolution quantique exacte : elle a en effet été obtenue à partir de l'équation cinétique opératorielle en tronquant le développement en gradients de la transformée de Wigner. En d'autres termes,

⁵Dans l'expérience du JILA, un nuage se trouve en $x = 0$ et l'autre est formé de deux parties situées à droite et à gauche du centre, voir la Fig. 3.1.

nous avons fait une approximation semi-classique. Mais pour le paquet d'onde "fantôme", la période d'oscillation dans l'espace p est $2\pi\hbar/d$ alors que la largeur du paquet est δx , de telle sorte que le paramètre du développement en gradients est $d/\delta x$, qui peut être plus grand que 1 : ainsi, notre équation cinétique n'est pas nécessairement correcte dans ce cas. Le développement semi-classique en gradients peut lisser les oscillations du paquet d'onde "fantôme" et introduire artificiellement de la décohérence. Une autre source possible de décohérence artificielle⁶ pourrait résulter de la discrétisation de l'espace de phase – nécessaire à la résolution numérique de l'équation cinétique –, qui introduit un pas de réseau dans l'espace des impulsions plus grand que δp .

Jusqu'à présent, dans notre description théorique, le système (i.e. le gaz froid piégé) est supposé être parfaitement isolé de son environnement : il n'y a donc pas de mécanisme de décohérence physique. Dans l'objectif d'obtenir une estimation du temps de décohérence d'un véritable gaz piégé, nous procédons par analogie avec une situation bien comprise de l'optique quantique : une superposition linéaire de deux états cohérents du champ électro-magnétique dans une cavité. Dans ce cas, on sait que la cohérence, et donc le paquet d'onde "fantôme", disparaît dès qu'un photon en moyenne s'échappe de la cavité et fuit dans l'environnement [78]. Nous *supposons* donc que la cohérence entre états internes des deux nuages atomiques disparaît dès qu'un atome quitte le piège. Dans le cas du gaz piégé ultrafroid, un mécanisme possible est la perte d'atomes causée par les collisions à 3 corps ("3-body losses" en anglais). Le temps nécessaire à un atome pour s'échapper du piège est $1/\alpha_{3b}n(0)^2N$ où $\alpha_{3b} \sim \times 10^{-29} \text{ cm}^6/\text{s}$ est le taux de recombinaison à 3 corps [79], $N \sim 10^6$ est le nombre total d'atomes et $n(0) \simeq 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ est la densité au centre du piège. On obtient $\sim 0.1 \text{ ms}$ qui est une estimation grossière du véritable temps de décohérence. C'est un temps extrêmement court en comparaison du temps caractéristique de la dynamique du système $\sim 50 \text{ ms}$. Notre conclusion est donc que, lorsque les deux nuages se recombinent, la cohérence ne joue aucun rôle dans ces expériences ; ceci justifie la discussion menée à propos de la fin du phénomène.

2.7 Appendice : Paquet d'onde "fantôme"

Dans cet appendice, nous précisons la notion de paquet d'onde "fantôme". C'est un phénomène qui se produit lorsqu'on étudie la transformée de Wigner de l'opérateur densité (i.e. la distribution de Wigner) d'un système dans une superposition cohérente macroscopique. Nous commençons par étudier l'exemple simple d'un atome (à 1D) avec deux états internes. Nous supposons qu'il est dans un état pur

⁶Nous pensons que cette deuxième source de décohérence artificielle n'est pas un problème dans nos calculs numériques. Nous avons vérifié que, si on retire l'intégrale de collision pour que l'équation cinétique devienne réversible, la polarisation de spin transverse disparaît lorsque les deux nuages ne se recouvrent plus mais réapparaît lorsqu'ils se recouvrent à nouveau.

donné par la fonction d'onde spinorielle suivante :

$$\underline{\psi}(x) = \psi_0(x - d/2)|1\rangle + \psi_0(x + d/2)|2\rangle \quad (2.36)$$

Nous choisissons la distance d plus grande que la largeur des paquets d'onde $\psi_0(x)$ (qui sont, par exemple, gaussiens). L'atome est alors dans une superposition cohérente macroscopique des deux états internes. La transformée de Wigner (par rapport aux variables orbitales) de l'opérateur densité $\hat{\rho} = |\underline{\psi}\rangle\langle\underline{\psi}|$ associé à cette fonction d'onde est

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_W(x, p) &= f_0(x - d/2, p)|1\rangle\langle 1| + f_0(x + d/2, p)|2\rangle\langle 2| \\ &+ e^{-ipd/\hbar} f_0(x, p)|1\rangle\langle 2| + e^{ipd/\hbar} f_0(x, p)|2\rangle\langle 1| \end{aligned} \quad (2.37)$$

où $f_0(x, p)$ est la transformée de Wigner de $|\psi_0\rangle\langle\psi_0|$.

On voit sur l'équation précédente que la distribution de Wigner est constituée de trois paquets d'ondes. Un paquet d'onde centré en $(x = d/2, p = 0)$ qui correspond à l'état interne $|1\rangle$. Un deuxième paquet centré en $(x = -d/2, p = 0)$ et qui correspond à l'état interne $|2\rangle$. Ces deux paquets d'onde sont "classiques" dans le sens où ils ne font apparaître que des valeurs positives de la distribution de Wigner. Un troisième paquet d'onde est centré en $(x = 0, p = 0)$ et correspond aux cohérences entre les deux états internes (i.e. à la polarisation transverse, dans le langage du pseudo-spin $1/2$). Ce paquet d'onde oscille entre valeurs positives et valeurs négatives avec une période $2\pi\hbar/d$ dans l'espace p . La distribution de Wigner a donc ici des valeurs négatives. C'est pourquoi on préfère souvent parler de quasi-distribution. Ce paquet d'onde "quantique", dans le sens où il fait intervenir des valeurs négatives de la distribution de Wigner, est le paquet d'onde "fantôme". Il manifeste la présence de cohérences entre les deux états internes et est donc du à des interférences quantiques.

La présence du paquet d'onde "fantôme" dans l'exemple précédent ne doit rien au choix d'un état pur $\psi_0(x)$ pour la partie orbitale. Un mélange statistique de tels états orbitaux (par exemple un nuage thermique d'atomes), c'est-à-dire un mélange statistique d'états orbitaux différents mais qui sont dans la même superposition cohérente des états internes, produit également un paquet d'onde "fantôme". Un tel état s'écrit

$$\hat{\rho} = \sum_j P_j |\underline{\psi}_j\rangle\langle\underline{\psi}_j| \quad (2.38)$$

où

$$\underline{\psi}_j(x) = \psi_j(x - d/2)|1\rangle + \psi_j(x + d/2)|2\rangle \quad (2.39)$$

et où les P_j sont des probabilités. La transformée de Wigner de cet opérateur densité $\hat{\rho}$ est

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_W(x, p) &= f(x - d/2, p)|1\rangle\langle 1| + f(x + d/2, p)|2\rangle\langle 2| \\ &+ e^{-ipd/\hbar} f(x, p)|1\rangle\langle 2| + e^{ipd/\hbar} f(x, p)|2\rangle\langle 1| \end{aligned}$$

où f est la transformée de Wigner de $\rho \equiv \sum_j P_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$. On retrouve bien la même structure que (2.37).

Dans la situation discutée en lien avec l'expérience de séparation des états de spin, le nuage correspondant à l'état $|2\rangle$ est situé en $x = 0$ et celui correspondant à l'état $|1\rangle$ est fait de deux parties en $x = \pm d$. On attend donc un paquet d'onde "fantôme" en $x = \pm d/2$.

On note que ce type de paquet d'onde oscillant est bien connu dans le contexte des superpositions macroscopiques d'états quasi-classiques appelées "chats de Schrödinger". Voir par exemple les Réf. [80] et [81] pour une étude de la distribution de Wigner de tels états et un modèle de l'influence de la décohérence.

Chapitre 3

Instabilité de Castaing dans un gaz froid piégé

Dans l'introduction du chapitre précédent, nous avons mentionné que les liquides de Fermi polarisés peuvent supporter des ondes de spin transverse [49, 67]. Castaing [11] a montré que dans un liquide de Fermi homogène où existe un gradient de polarisation longitudinale suffisamment fort, les ondes de spin transverse de grande longueur d'onde sont instables et peuvent donc s'exciter spontanément. Ce phénomène est appelé instabilité de Castaing. Le mécanisme à l'origine de cette instabilité repose sur l'existence d'un fort gradient de polarisation longitudinale *et* d'un champ moyen de spin important.

L'instabilité de Castaing a surtout été étudiée dans les liquides de Fermi, tels que l' ^3He à basse température, où son observation expérimentale est indirecte : elle repose sur des expériences de résonance magnétique nucléaire de type “échos de spin” ou de mesures de diffusion de spin longitudinal (voir Réf. [82], par exemple). Dans ce chapitre, nous considérons un système semblable à celui de l'expérience de séparation des états de spin du chapitre précédent : un gaz froid piégé avec deux états internes. Nous avons vu que dans ce système l'effet de rotation des spins identiques (ISRE) crée un champ moyen de spin. Il est donc légitime de se demander si l'instabilité de Castaing existe dans un gaz froid piégé [12]. C'est à cette question que nous voulons répondre dans ce chapitre. Nous commençons par rappeler la théorie originale de Castaing, avant d'utiliser l'équation cinétique obtenue dans le premier chapitre pour étudier le cas d'un gaz froid piégé [28].

3.1 Instabilité de Castaing : théorie hydrodynamique

Dans un article de 1984, Castaing considère un échantillon homogène d' ^3He liquide dans lequel règne un gradient de polarisation de spin longitudinale. Il étudie la stabilité des ondes de spin transverse et constate qu'un fort gradient de polari-

sation longitudinale les rend instables [11]. Son étude repose sur les équations de l'hydrodynamique des spins de Leggett [67]. Nous adaptons dans ce paragraphe la théorie de Castaing à un gaz bosonique froid homogène et quasi-unidimensionnel¹ en utilisant les équations de Leggett obtenues dans le chapitre précédent, équations (2.26) et (2.27). Nous les reproduisons ici dans le cas où il n'y a pas de piège et où le champ magnétique externe est uniforme :

$$\begin{aligned}\partial_t \mathbf{m} + \partial_x \mathbf{j} &= 0 \\ \partial_t \mathbf{j} + \frac{D}{\tau} \partial_x \mathbf{m} - \frac{\mu}{\tau} \frac{\mathbf{m}}{n(0)} \times \mathbf{j} &\simeq -\frac{\mathbf{j}}{\tau}\end{aligned}\quad (3.1)$$

Ces équations sont écrites dans le référentiel de Larmor et sous une forme proche de celle de l'article de Castaing [11]. Dans tout ce chapitre, le paramètre ISRE μ est défini avec un facteur 1/2 de différence par rapport au chapitre précédent :

$$\mu \equiv \frac{g_{12}n(0)\tau}{2\hbar} \quad (3.2)$$

Le coefficient de diffusion de spin D est :

$$D = \frac{k_B T}{m} \tau \quad (3.3)$$

Nous considérons un gaz dans lequel existe une polarisation longitudinale $m_{\parallel}^0(x)$ faiblement inhomogène et constante dans le temps. Nous étudions alors l'évolution d'une petite polarisation transverse (de type onde plane) autour d'une solution stationnaire faiblement non-uniforme :

$$\begin{aligned}\mathbf{m}(x, t) &= m_{\parallel}^0(x) \mathbf{e}_{\parallel} + \delta \mathbf{m} e^{i(kx - \omega t)} \\ \mathbf{j}(x, t) &= -D \partial_x m_{\parallel}^0(x) \mathbf{e}_{\parallel} + \delta \mathbf{j} e^{i(kx - \omega t)}\end{aligned}\quad (3.4)$$

où ω est la pulsation de l'onde plane et k son vecteur d'onde. Supposer que le gradient de polarisation longitudinale est faible revient à ne considérer que des vecteurs d'onde k tels que $kL_m \gg 1$, où L_m est la taille caractéristique du gradient de polarisation longitudinale. Nous faisons l'hypothèse d'étudier un mode dans le régime hydrodynamique (i.e. tel que $\omega\tau \ll 1$), ce qui permet de négliger la dérivée partielle par rapport au temps du courant de polarisation $\partial_t \mathbf{j} \simeq 0$ dans les équations (3.1). En injectant les équations (3.4) dans les équations de Leggett (3.1), nous obtenons le spectre suivant pour les ondes de spin transverse polarisées circulairement :

$$\omega = \frac{D}{1 + (\mu m_{\parallel}^0/n)^2} (\mu m_{\parallel}^0/n - i) \left(k^2 - \mu k \frac{\partial_x m_{\parallel}^0}{n} \right) \quad (3.5)$$

¹Dans la suite, nous aurons en tête le cas de l'expérience du JILA [2] où un gaz de ^{87}Rb est confiné dans un piège en forme de cigare et dont on a montré dans le chapitre précédent que la théorie cinétique est effectivement unidimensionnelle le long de l'axe.

La relation de dispersion précédente redonne, en l'absence de gradient de polarisation longitudinale et lorsque $\mu m_{\parallel}^0/n \gg 1$, le résultat bien connu [7, 61] :

$$\omega \simeq \frac{D}{\mu m_{\parallel}^0/n} k^2 - i \frac{D}{(\mu m_{\parallel}^0/n)^2} k^2 \quad (3.6)$$

Cette relation décrit des ondes de spin transverse faiblement amorties, en régime hydrodynamique.

La relation de dispersion (3.5) montre qu'en présence d'un gradient de polarisation longitudinale la partie imaginaire ω_I de la fréquence propre peut changer de signe et être strictement positive. Ceci traduit la possibilité d'une instabilité. La condition d'instabilité s'écrit :

$$k^2 < \mu k \frac{\partial_x m_{\parallel}^0}{n} \quad (3.7)$$

On voit sur l'équation précédente que l'instabilité de Castaing concerne les modes transverses de grande longueur d'onde. En réalité, l'inégalité précédente a été obtenue sous l'hypothèse que $|k|L_m \gg 1$, ce qui implique la condition suivante :

$$\frac{1}{L_m} \ll \mu \frac{|\partial_x m_{\parallel}^0|}{n} \quad (3.8)$$

Pour avoir une instabilité, il est donc nécessaire d'avoir un champ moyen de spin, i.e. un paramètre ISRE μ , et un gradient de polarisation longitudinale $|\partial_x m_{\parallel}^0|/n$ suffisamment importants. Dans le cas d'un gradient de polarisation linéaire sur une distance $L_m \equiv \Delta m_{\parallel}^0/|\partial_x m_{\parallel}^0|$, la condition d'instabilité devient [11] :

$$1 \ll \mu \frac{\Delta m_{\parallel}^0}{n} \quad (3.9)$$

où $\Delta m_{\parallel}^0$ est la variation de polarisation longitudinale sur la taille de la boîte $L = L_m$.

3.2 Gaz froid piégé : théorie cinétique

Nous voulons maintenant tester l'existence de l'instabilité de Castaing dans un gaz froid piégé. Kuklov et Meyerovich [12] ont été les premiers à suggéré la présence de l'instabilité dans ce système. Leur étude repose sur des arguments qualitatifs basés sur la théorie originale de Castaing. Ici, nous voulons faire une étude quantitative dans un système proche des expérience du JILA [2, 54]. Pour cela, nous utilisons l'équation cinétique (2.16) obtenue dans le chapitre précédent.

La situation que nous considérons ici est plus riche que celle originalement imaginée par Castaing pour plusieurs raisons : (i) en utilisant l'équation cinétique,

nous ne nous limitons pas au domaine de validité des équations de Leggett ; (ii) le gradient de polarisation longitudinal n'est pas supposé constant mais son évolution temporelle dans le piège est calculée ; (iii) nous tenons compte d'un éventuel gradient de champ magnétique externe.

3.2.1 Equation cinétique et solution numérique

Nous considérons le même système que dans le chapitre précédent : un gaz atomique froid peu dégénéré, confiné dans un piège magnétique en forme de cigare. Les atomes ont deux niveaux internes $|1\rangle$ et $|2\rangle$. Initialement, le gaz est constitué de deux nuages séparés spatialement. Un nuage centré en $x < 0$, i.e. à gauche du centre du piège, contient des atomes tous dans l'état interne $|1\rangle$, un deuxième nuage centré en $x > 0$ contient des atomes tous dans l'état interne $|2\rangle$. Ceci pourrait être réalisé expérimentalement en préparant un nuage d'atome dans l'état $|1\rangle$ et un nuage d'atomes dans l'état $|2\rangle$ piégés magnétiquement et séparés par une barrière de potentiel optique abrupte au centre du piège. Lorsqu'on retire la barrière optique, les deux nuages se mélangent et dans leur zone de recouvrement existe alors un fort gradient de polarisation longitudinale au centre du piège (voir Fig. 3.1). Si il est suffisamment fort, il devrait être possible d'observer l'instabilité de Castaing, c'est-à-dire l'apparition spontanée d'ondes de spin transverse.

L'équation cinétique (2.16) qui décrit ce système est reproduite ici :

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{p}{m} \partial_x f - m\omega_{ax}^2 x \partial_p f &\simeq - \frac{f - f^{eq}}{\tau} \\ \partial_t \mathbf{M} + \frac{p}{m} \partial_x \mathbf{M} - m\omega_{ax}^2 x \partial_p \mathbf{M} - \left(\boldsymbol{\Omega} + \frac{g_{12}\mathbf{m}}{2\hbar} \right) \times \mathbf{M} \\ &\simeq - \frac{\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq}}{\tau} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Elle est résolue numériquement en utilisant un programme similaire à celui développé pour l'expérience de séparation des états de spin du chapitre précédent. Nous supposons que la densité dans l'espace de phase est initialement à l'équilibre (voir l'équation (2.18)) :

$$f(x, p, t = 0) = f_{MB}(x, p) \propto e^{-x^2/2x_T^2 - p^2/2p_T^2} \quad (3.11)$$

Comme cette distribution n'évolue pas sous l'action de l'équation cinétique, la densité locale est constante. Nous ne considérons plus à présent que l'évolution de la distribution de polarisation dans l'espace de phase $\mathbf{M}$. La distribution de polarisation initiale est supposée être le produit de la distribution de Maxwell-Boltzmann orientée suivant la direction longitudinale dans l'espace de spin $f_{MB}(x, p)\mathbf{e}_{\parallel}$ et d'une fonction continue qui vaut -1 à gauche du centre du piège ($x < -x_T$), $+1$ à droite ($x > x_T$) et a une pente positive constante proche du centre ($-x_T < x < x_T$). La densité d'atomes dans les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ qui en résulte est représentée dans la Fig. 3.1.

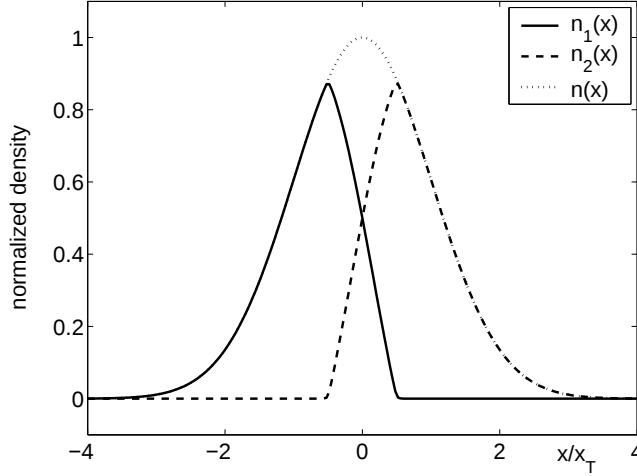


FIG. 3.1 – Densité initiale d’atomes dans l’état $|1\rangle$ (trait plein) et $|2\rangle$ (tirets). Cette configuration crée un fort gradient de polarisation longitudinal près du centre du piège ($|\partial_x m_{\parallel}^0|/n(0) = 2/x_T$). La densité totale est représentée par des pointillés.

Pour démarrer l’instabilité, nous introduisons une petite perturbation transverse. En effet, le bruit numérique seul ne permet pas de la déclencher. Sans perte de généralité, la perturbation peut être écrite sous la forme d’une onde plane (de fréquence spatiale $1/x_T$) multipliée par la distribution de Maxwell-Boltzmann et divisée par un grand nombre $\mathcal{N} \gg 1$, typiquement entre 10^3 et 10^6 :

$$M_{\perp,1}(x, p) = f_{MB}(x, p) \cos(\pi x/x_T)/\mathcal{N} \quad (3.12)$$

C’est la forme qu’on attend intuitivement pour le mode le plus instable qui vérifie les conditions aux bords imposées par une boîte de taille environ égale à celle du gaz dans le piège $\sim x_T$. Le nombre $\mathcal{N}$ assure qu’il s’agit d’une petite perturbation.

Les paramètres utilisés dans le calcul numérique sont les mêmes que lors de l’étude de la séparation des états de spin. Le gradient de polarisation longitudinale proche du centre du piège peut être modifié et vaut typiquement $|\partial_x m_{\parallel}|/n(0) \sim 2/x_T$. Le paramètre ISRE vaut environ $\mu \sim 5$. Avec ces paramètres, nous observons une instabilité dans les simulations numériques mais elle est sans doute trop faible pour être mesurée expérimentalement. Pour augmenter l’effet de l’instabilité, nous prenons une longueur de diffusion 5 fois plus petite ($a_{12} \rightarrow a_{12}/5$) et une fréquence de piégeage axiale 20 fois plus petite ($\omega_{ax} \rightarrow \omega_{ax}/20$), tout en gardant la densité au centre du piège constante. Nous discutons de ces changements dans la suite.

Comme l’espace de phase est modélisé par un réseau discret fini, il est important de distinguer une instabilité physique d’une instabilité numérique. Pour cela, il suffit de changer la densité du maillage dans l’espace de phase. On peut toujours se débarrasser d’une instabilité numérique en prenant un maillage suffisamment fin.

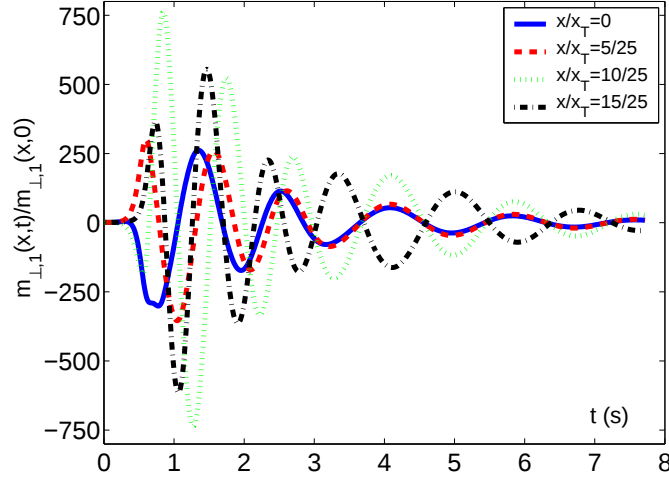


FIG. 3.2 – Evolution temporelle de la polarisation transverse (normalisée) $m_{\perp,1}(x,t)/m_{\perp,1}(x,0)$ en différentes positions du piège : $x/x_T = 0$ (trait plein) ; $5/25$ (tirets) ; $10/25$ (pointillés) ; $15/25$ (tirets-pointillés). Les paramètres sont $\mu \simeq 22$, $\omega_{ax}\tau \simeq 0.6$, $\delta\Omega/\omega_{ax} = 2$, $|\partial_x m_{\parallel}^0|/n(0) = 2/x_T$ et $\mathcal{N} = 10^3$.

Les résultats du calcul numérique sont représentés dans les Fig. 3.2 et 3.3. La première figure montre l'évolution temporelle de la polarisation transverse en différentes positions proches du centre du piège, i.e. là où le gradient de polarisation longitudinale est le plus prononcé. L'instabilité de Castaing y est clairement visible : la perturbation initiale est multipliée, au maximum de l'effet, par un facteur comparable à $\mathcal{N}$. La deuxième figure représente l'évolution temporelle du logarithme de la polarisation transverse normalisée au centre du piège. Dans cette représentation logarithmique, on distingue facilement la croissance exponentielle de l'enveloppe, après un court temps de l'ordre de grandeur du temps entre collisions, puis sa décroissance exponentielle.

3.2.2 Discussion

La croissance initiale de la polarisation transverse montre que l'instabilité de Castaing se produit. Nous avons déjà signalé que les résultats présentés ici sont obtenus pour une longueur de diffusion a_{12} et une fréquence de piégeage ω_{ax} plus petites que celles de l'expérience du JILA [2] (respectivement par un facteur 5 et un facteur 20). Nous avons modifié ces valeurs expérimentales de manière à augmenter l'effet du champ moyen de spin et donc à favoriser l'instabilité. Ceci est réalisable expérimentalement en utilisant une résonance de Feshbach [83] pour diminuer la longueur de diffusion². En effet, nous rappelons que le paramètre ISRE

²Une résonance de Feshbach est une résonance de la longueur de diffusion a en fonction d'un champ magnétique externe. A une valeur particulière du champ magnétique, la longueur de

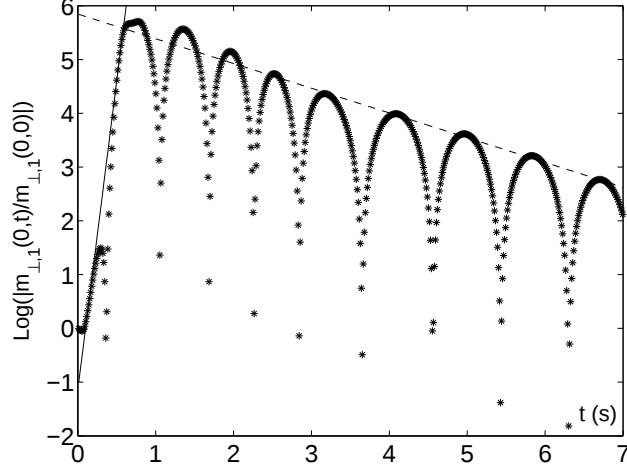


FIG. 3.3 – Evolution temporelle du logarithme de la polarisation transverse normalisée $m_{\perp,1}(0,t)/m_{\perp,1}(0,0)$ au centre du piège. Les deux droites permettent de visualiser la croissance exponentielle de l'instabilité (trait plein) et la décroissance exponentielle de l'onde de spin transverse (tirets). Les paramètres ont les mêmes valeurs que pour la Fig. 3.2.

qui mesure “l'intensité” du champ moyen de spin est inversement proportionnel à la longueur de diffusion : $\mu \sim \lambda_T/a_{12}$. Nous montrons plus loin que la condition $\omega_{ax}\tau \lesssim 1$ est nécessaire pour déclencher l'instabilité de Castaing. Si nous voulons maintenir le produit $\omega_{ax}\tau$ constant lorsqu'on modifie la longueur de diffusion, il est nécessaire de modifier la fréquence de piégeage axiale ω_{ax} proportionnellement au carré de la longueur de diffusion, car le temps moyen entre collisions τ est inversement proportionnel au carré de la longueur de diffusion $\tau \propto a_{12}^{-2}$. Cette façon d'augmenter le champ moyen de spin permet de rester dans le régime où le gaz est peu dégénéré.

Le phénomène observé dans les Fig. 3.2 et 3.3 peut être décomposé en quatre étapes :

I.) Durant un temps de l'ordre de grandeur du temps entre collisions $\tau \sim 0.25$ s, une description hydrodynamique n'est pas valable car le courant de polarisation n'a pas encore pu atteindre sa valeur stationnaire. Les Fig. 3.2 et 3.3 montrent que la polarisation transverse n'évolue pas significativement.

II.) L'enveloppe de la polarisation transverse croît ensuite exponentiellement (voir la Fig. 3.3). Le coefficient de l'exponentielle $e^{i\omega_I t}$, i.e. ω_I , est presque constant. Une croissance exponentielle est caractéristique d'une instabilité. La valeur de ω_I est modifiée par la présence du piège par rapport à la valeur prédite par la théorie de Castaing du système homogène, voir l'équation (3.5). Une estimation du temps

diffusion passe par $\pm\infty$. A proximité de la résonance il est possible d'annuler la longueur de diffusion et de lui faire changer de signe.

caractéristique de croissance de l'instabilité [12] est donnée par l'inverse de ω_I , c'est-à-dire :

$$t_{inst} \sim L_m^2/D \simeq 1/\omega_{ax}^2 \tau \sim 1 \text{ s} \quad (3.13)$$

où L_m est la taille caractéristique du gradient de polarisation longitudinale ($L_m \simeq x_T$). On retrouve l'ordre de grandeur du maximum de l'instabilité observé dans la solution numérique de l'équation cinétique. L'instabilité ne peut se développer que si le courant de polarisation a atteint sa valeur stationnaire, c'est-à-dire si $\tau < t_{inst}$ ce qui implique le condition $\omega_{ax} \tau \lesssim 1$.

III.) La partie imaginaire de la fréquence propre ω_I n'est pas constante dans le temps, mais évolue lentement car le gradient de polarisation longitudinale décroît en raison de la diffusion de spin et de la présence du piège. Le changement de signe de ω_I (passage de positif à négatif) marque la fin de la croissance exponentielle. Une fois que ω_I est négative, la polarisation transverse décroît comme une onde de spin amortie.

IV.) Le gradient de polarisation longitudinale décroît finalement jusqu'à zéro en un temps de l'ordre du temps de diffusion de spin :

$$t_{diff} \sim L^2/D \sim 4 \text{ s} \quad (3.14)$$

où L est la taille du nuage ($L/x_T \sim 2$). Kuklov et Meyerovich [46] ont signalé que, si $L > L_m$, l'instabilité se développe plus vite que ne relaxe le gradient de polarisation longitudinale, en accord avec nos calculs numériques. Une fois que la polarisation longitudinale est nulle, ω_I est constante et l'enveloppe des ondes de spin transverse décroît exponentiellement (trait en tirets dans la Fig. 3.3). Ceci se produit pour $t \gtrsim t_{diff}$. La fréquence des ondes de spin n'est pas complètement déterminée par la partie réelle de la fréquence propre de l'équation (3.5), car cette équation est obtenue pour un système homogène en l'absence de gradient du champ magnétique externe. En réalité, la fréquence des ondes de spin transverse dans notre système est essentiellement liée à la présence d'un champ magnétique externe inhomogène $\delta\Omega = 2\omega_{ax} \simeq 2\pi \times 0.7 \text{ Hz}$. Nous avons vérifié que lorsque $\delta\Omega = 0$, la polarisation transverse au centre du piège n'oscille pas.

Le critère d'instabilité (3.8) est qualitativement vérifié si on prend $L_m \sim x_T$:

$$\mu \frac{|\partial_x m_{\parallel}^0|}{n(0)} \gg \frac{1}{x_T} \quad (3.15)$$

En utilisant un gradient de polarisation longitudinale $|\partial_x m_{\parallel}^0|/n(0) = 2/x_T$, le critère précédent implique que le paramètre ISRE μ doit être plus grand que $\sim 1/2$ pour déclencher une instabilité. Nos calculs numériques montrent que le seuil d'instabilité se situe à $\mu \simeq 4$. Pour obtenir une instabilité significative, il faut prendre un paramètre ISRE μ environ un ordre de grandeur plus grand.

Nous discutons à présent de la pertinence du critère précédent pour l'expérience de séparation des états de spin du JILA [2] discutée dans le chapitre précédent.

Le gradient de polarisation longitudinale maximal est atteint au maximum de la séparation des états de spin (i.e. vers 100 ms dans [2]). Son ordre de grandeur est $|\partial_x m_{\parallel}|/n(0) \sim 1/x_T$ (estimé en $x \sim \pm x_T/2$). La valeur du paramètre ISRE étant $\mu \sim 5$, le critère d'instabilité obtenu numériquement

$$\mu \frac{|\partial_x m_{\parallel}^0|}{n(0)} \gtrsim \frac{8}{x_T} \quad (3.16)$$

prédit l'absence d'instabilité. Nous ne savons pas si il est expérimentalement possible de réaliser une séparation totale des états de spin de telle sorte que lors du retour à l'équilibre des nuages atomiques, le gradient de polarisation longitudinale soit suffisamment important pour déclencher l'instabilité de Castaing. Un très fort gradient, dans le cas où $\mu \sim 5$, n'est sans doute pas suffisant pour démarrer l'instabilité car la diffusion de spin est très efficace pour annuler un fort gradient. Il faudrait trouver une procédure permettant de maintenir un gradient constant, i.e. de corriger la diffusion de spin, pour pouvoir observer l'instabilité de Castaing avec la valeur expérimentale actuelle de μ dans l'expérience du JILA.

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons confirmé la possibilité mise en avant par Kuklov et Meyerovich [12] d'observer l'instabilité de Castaing dans un gaz froid piégé avec deux états internes. Pour cela, nous avons eu recours à une méthode numérique de résolution de l'équation cinétique, qui permet d'aller au-delà du traitement habituel de l'instabilité de Castaing basé sur l'hydrodynamique de spin, i.e. sur les équations de Leggett. Nous avons aussi vérifié que l'instabilité de Castaing n'a pas d'effet mesurable dans l'expérience de séparation des états de spin réalisée au JILA [2], car le paramètre ISRE μ , qui mesure l'intensité du champ moyen de spin, et le gradient de polarisation longitudinale sont trop faibles. Il devrait cependant être possible d'observer l'instabilité de Castaing dans d'autres expériences si les paramètres tels que la fréquence de piégeage et la longueur de diffusion a_{12} sont choisis correctement. Nous suggérons alors l'utilisation de cette instabilité pour créer spontanément des ondes de spin transverse.

Nos calculs sont également valables pour un gaz de Fermi en faisant les modifications suivantes : le champ moyen de spin change de signe (à cause du facteur $\epsilon = -1$) et $g_{11} = g_{22} = 0$. L'expérience de Salomon à l'ENS sur le ${}^6\text{Li}$ est certainement un bon candidat, puisque la résonance de Feshbach sur la longueur de diffusion ${}^3 a_{12}$ a été récemment observée [84] : ceci devrait permettre de contrôler le champ moyen de spin et donc de déclencher l'instabilité de Castaing.

³Résonance de Feshbach sur la longueur de diffusion entre les états $|F = 1/2, m_F = 1/2\rangle$ et $|1/2, -1/2\rangle$.

Chapitre 4

Modes hydrodynamiques du gaz de Bose unidimensionnel piégé

Ce chapitre concerne le transport dans un gaz de Bose unidimensionnel (1D) piégé à température nulle. L'intérêt d'un tel système est à la fois théorique et expérimental. Au cours des dernières années, de nombreuses équipes ont réussi à piéger des gaz de Bose ultrafroids dans des pièges très anisotropes [13, 14, 15]. Dans un piège en forme de cigare, si le confinement radial est suffisamment fort, le gaz se comporte comme un système 1D. Les études théoriques du gaz de Bose 1D montrent que ce système possède de nombreuses propriétés intéressantes. Ainsi, contrairement au gaz tridimensionnel (3D), la limite de fort couplage est celle de basse densité. De plus, même à température nulle, le système n'est pas condensé de Bose-Einstein et pourtant il peut être superfluide [85]. Un modèle particulièrement instructif est celui de Lieb-Liniger [86] : il s'agit d'un gaz homogène de bosons 1D en interaction répulsive de portée nulle $g_1\delta(z)$. L'intérêt de ce modèle est qu'il est intégrable par ansatz de Bethe. Lieb et Liniger ont donné la solution exacte de ce problème et étudié l'état fondamental [86] et les excitations élémentaires du système [87]. Leur étude confirme l'absence de condensat de Bose-Einstein (BEC) quelque soit l'intensité de la répulsion entre bosons. Dans la limite où la répulsion devient infinie ($g_1 \rightarrow \infty$), les bosons sont impénétrables et se comportent comme des fermions sans spin. On parle de gaz de Tonks-Girardeau [88, 89]. Girardeau [89] a montré que dans cette limite, le gaz de Bose 1D est en correspondance biunivoque avec le gaz de Fermi parfait à 1D : les excitations élémentaires sont des phonons dont la vitesse est celle de Fermi. Dans la limite opposée, de faible couplage ($g_1 \rightarrow 0$), Lieb et Liniger ont constaté que la théorie de champ moyen du gaz de Bose, dite de Bogolubov [90], est valable. Ceci traduit l'existence d'un quasi-condensat dont les excitations élémentaires sont les phonons de Bogolubov.

Un outil expérimental particulièrement utile pour sonder les gaz ultrafroids piégés est l'étude des modes collectifs d'oscillation [16]. Ils fournissent une information in situ sur le gaz sans que l'on soit obligé d'ouvrir le piège et de faire des mesures après un temps de vol ("time of flight" en anglais). Ils sont également importants

d'un point de vue théorique car ils correspondent aux excitations élémentaires de basse énergie et sont donc essentiels à la compréhension des propriétés macroscopiques du gaz. Pour étudier ces modes, l'hydrodynamique est une approche théorique fructueuse. Elle permet, en effet, d'étudier des systèmes fortement interagissants, alors que la plupart des approches théoriques microscopiques ne peuvent traiter que les gaz dans le régime de couplage faible. Cependant, c'est une méthode macroscopique qui nécessite de connaître l'équation d'état du gaz homogène. Le cas du gaz de Bose 1D est alors particulièrement intéressant car, comme nous l'avons mentionné plus haut, il existe des modèles exactement solubles dont on peut extraire l'équation d'état du gaz homogène pour calculer ensuite les modes hydrodynamiques du gaz piégé. C'est l'approche employée par Menotti et Stringari [18]. Leur méthode de résolution des équations hydrodynamiques utilise les règles de somme [91] et permet d'obtenir une borne supérieure à la fréquence des modes hydrodynamiques. Dans le contexte du gaz de Fermi 3D attractif, Combescot et Leyronas [17] ont proposé une méthode de résolution alternative qui permet, en principe, d'obtenir la fréquence exacte des modes. Le but de notre travail est l'application et l'extension de cette méthode au cas du gaz de Bose 1D piégé.

Nous commençons par discuter du gaz de Bose 1D dans la situation originellement considérée par Menotti et Stringari. Dans la suite nous décrivons l'hydrodynamique de ce gaz et discutons son domaine de validité. Puis nous présentons la méthode de Combescot et Leyronas qui permet de déterminer la fréquence des modes hydrodynamiques à partir de l'équation d'état du gaz. Finalement, nous présentons les résultats obtenus pour le calcul du mode hydrodynamique de fréquence la plus basse du gaz de Bose 1D piégé à température nulle [30].

4.1 Le gaz de Bose 1D piégé à $T = 0$

Nous étudions dans ce paragraphe le même système que celui envisagé par Menotti et Stringari [18] (MS). Ils considèrent un système tridimensionnel (3D) très anisotrope qu'il est possible de faire tendre vers un système 1D en faisant varier un paramètre. Plus précisément, il s'agit d'un gaz 3D de bosons, sans structure interne, confiné dans un piège très allongé, en forme de cigare. Le gaz est supposé être à très basse température ($T = 0$). Il est donc fortement dégénéré et les collisions se produisent dans le régime quantique où elles sont décrites par la longueur de diffusion $a > 0$. Le gaz est confiné dans un piège harmonique anisotrope à symétrie axiale¹, dont la pulsation radiale $\omega_{rad} \equiv \omega_{\perp}$ est très grande devant la pulsation axiale $\omega_{ax} \equiv \omega_z$: $\omega_{\perp} \gg \omega_z$. On suppose, de plus, que la longueur d'oscillateur radiale $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ est très grande devant la longueur de diffusion : $a_{\perp} \gg a$. Dans cette limite, Olshanii [92] a montré que la longueur de diffusion effective 1D est donnée par $a_1 = a_{\perp}^2/a$. Nous définissons plus loin la densité 1D le long de l'axe

¹Contrairement aux chapitres précédents, l'axe du cigare est ici pris le long de $\mathcal{O}z$.

du piège $n_1(z)$. En changeant la densité 1D au centre du piège $n_1(0)$, on peut faire passer continûment le gaz d'un régime 3D à un régime 1D, dans un sens qui est précisé plus loin.

Une quantité importante pour la suite est le potentiel chimique μ du gaz *homogène* le long de l'axe $\mathcal{O}z$, i.e. lorsque $\omega_z = 0$ et $\omega_\perp \neq 0$. Il est défini par :

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} \quad (4.1)$$

où la dérivée partielle est prise à volume de gaz fixé et où E_0 est l'énergie de l'état fondamental du gaz de N bosons lorsque $\omega_z = 0$ et $\omega_\perp \neq 0$. Le zéro du potentiel chimique est choisi de telle sorte que $\mu(n_1 = 0) = 0$.

Lorsque le potentiel chimique μ et le quantum d'oscillateur axial $\hbar\omega_z$ sont beaucoup plus petits que le quantum d'oscillateur radial $\hbar\omega_\perp$, tous les atomes sont dans la fonction d'onde Gaussienne décrivant l'état fondamental de l'oscillateur harmonique radial. Les degrés de liberté radiaux sont gelés, le mouvement radial des atomes est alors confiné aux oscillations de point zéro. A un décalage global de l'énergie près, le système est décrit par un Hamiltonien 1D et toute la dynamique est donc unidimensionnelle. Une situation moins extrême est celle où seuls les degrés de liberté *collectifs* radiaux sont gelés. C'est-à-dire que l'hydrodynamique du gaz est unidimensionnelle même si les degrés de liberté microscopiques radiaux ne sont pas gelés. Pour être dans cette situation, il suffit d'avoir $\omega_\perp \gg \omega_z$, ce qui permet de supposer que le système est en permanence à l'équilibre local dans les directions radiales. C'est le cas dans le système que nous considérons. Dans la Réf. [30], nous montrons que l'hydrodynamique s'écrit effectivement sous forme unidimensionnelle et que la densité 1D $n_1(z)$ est simplement la moyenne sur les directions radiales de la densité 3D $n_0(\mathbf{r})$:

$$n_1(z) \equiv \int d^2\mathbf{r}_\perp n_0(\mathbf{r}) = \frac{2\pi}{m\omega_\perp^2} \int_0^{\mu(z)} d\mu n_0(\mu) \quad (4.2)$$

C'est pourquoi nous parlons de gaz de Bose 1D même si le système de départ est en réalité un gaz de Bose 3D confiné dans un piège en forme de cigare. En résumé, lorsque $\omega_\perp \gg \omega_z$, l'hydrodynamique du gaz est unidimensionnelle le long de l'axe du cigare et il suffit alors de connaître l'équation d'état $\mu(n_1)$.

Menotti et Stringari [18] ont identifié trois régimes limites de comportement en fonction de la densité 1D au centre du piège $n_1(0)$:

I.) A très haute densité $n_1(0)a \gg 1$, le système est un condensat de Bose-Einstein (BEC) 3D très allongé, en forme de cigare, décrit par l'équation de champ moyen de Gross-Pitaevskii [93]. Dans les directions radiales, le condensat est beaucoup plus large que l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Les énergies potentielles d'interaction et de piégeage dominant l'énergie cinétique que l'on néglige dans l'équation de Gross-Pitaevskii : c'est l'approximation de Thomas-Fermi [16]. Ce régime est appelé "cigare 3D". Dans ce cas, le potentiel chimique est relié

à la densité 1D par :

$$\mu = 2\hbar\omega_{\perp}(an_1)^{1/2} \quad (4.3)$$

II.) A densité intermédiaire $n_1(0)a_1 \gg 1 \gg n_1(0)a$, le gaz est un quasi-condensat 1D². On peut le décrire comme la limite basse densité d'un BEC 3D en forme de cigare, dont la dimension radiale tend vers celle de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Les degrés de liberté radiaux sont gelés. Ce régime est appelé "champ moyen 1D". Alternativement, on peut le décrire comme la limite haute densité (i.e. faiblement interagissante, voir ci-dessous) d'un gaz de bosons répulsifs unidimensionnel. Le potentiel chimique est :

$$\mu = 2\hbar\omega_{\perp}an_1 \quad (4.4)$$

III.) Finalement, à basse densité $1 \gg n_1(0)a_1$, le système est un gaz 1D de bosons impénétrables : c'est le régime de "Tonks-Girardeau" [88, 89]. Les degrés de liberté radiaux sont gelés. Dans ce système, les interactions répulsives entre bosons sont tellement fortes que le gaz se comporte comme un gaz parfait de Fermi 1D [89]. Le potentiel chimique est donné par l'énergie de Fermi du gaz parfait :

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (\pi n_1)^2}{2m} \quad (4.5)$$

Il est utile de revenir ici sur le critère permettant d'affirmer qu'un gaz est faiblement interagissant et qu'on peut donc le décrire par une théorie de champ moyen. On considère un gaz en dimension D dont les interactions sont décrites, à basse température, par la constante de couplage g_D proportionnelle à une énergie par unité de volume. A 3D, $g_3 = 4\pi\hbar^2 a/m$, alors que $g_1 = 2\hbar^2/ma_1 = 2\hbar^2 a/ma_{\perp}^2$ à 1D [92]. On cherche à former une quantité sans dimension mesurant l'intensité des interactions, i.e. proportionnelle à g_D , à partir des seules grandeurs disponibles que sont g_D , $\hbar$, m et n_D , la densité de particules à D dimensions³. La seule possibilité est :

$$\gamma_D = \frac{mg_D}{\hbar^2} n_D^{1-2/D} \quad (4.6)$$

²Un quasi-condensat est un système de Bose dans lequel il n'existe pas, à strictement parler, d'ordre non-diagonal à longue portée, mais où la matrice densité à un corps décroît néanmoins très lentement à grande distance. Il s'agit donc d'un condensat dont la phase fluctue (voir Réf. [94], par exemple).

³On note la différence suivante entre le gaz de Fermi et le gaz de Bose. Pour le gaz de Fermi, le paramètre γ_D peut être vu comme une estimation du rapport entre l'énergie d'interaction de champ moyen $g_D n_D$ et l'énergie cinétique $\sim \hbar^2 n_D^{2/D}/m$, i.e. l'énergie de Fermi, lorsque les interactions sont faibles. Pour le gaz de Bose, la situation est très différente. En effet, lorsque les interactions sont faibles, l'énergie cinétique d'un gaz de Bose à $T = 0$ est presque nulle et le rapport entre l'énergie d'interaction de champ moyen et l'énergie cinétique diverge. Ceci se manifeste dans le fait que la théorie de perturbation usuelle n'est pas applicable au gaz de Bose. Il faut utiliser une théorie plus élaborée – la théorie de Bogolubov – qui montre que l'énergie cinétique est une fonction non-analytique de γ_D quand γ_D tend vers zéro.

A 1D, $\gamma_1 \propto n_1^{-1}$ et les interactions dominent à *basse* densité [86]. Ainsi, contrairement à la situation à 3D où $\gamma_3 \propto n_3^{1/3}$, le système est fortement interagissant dans la limite diluée (régime de Tonks-Girardeau) et faiblement interagissant dans la limite dense (régime de champ moyen 1D). Lors du passage du régime tridimensionnel (cigare 3D) au régime unidimensionnel (champ moyen 1D), l'hypothèse $a_\perp/a \gg 1$ permet de s'assurer que le gaz est faiblement interagissant car $\gamma_3 \sim n_3^{1/3}a \ll 1$. On peut donc décrire, dans ce cas, la transition 3D $\rightarrow$ 1D par une théorie de champ moyen telle que l'équation de Gross-Pitaevskii [93].

Dans la suite nous aurons besoin de l'équation d'état du gaz de Bose 1D homogène, c'est-à-dire du potentiel chimique μ en fonction de la densité n_1 . Pour décrire la transition du régime de cigare 3D au régime de champ moyen 1D, on utilise l'équation de Gross-Pitaevskii dans la géométrie du guide d'onde, où $\omega_z = 0$ et $\omega_\perp \neq 0$. Elle peut être résolue analytiquement dans les deux régimes limites du cigare 3D et du champ moyen 1D [18] et conduit aux potentiels chimiques donnés dans les équations (4.3) et (4.4). Entre ces deux limites, MS ont utilisé une méthode numérique pour obtenir l'équation d'état [18]. Leur résultat numérique nous sert dans la suite [95]. Nous utilisons également une formule analytique approchée qui donne le comportement exact dans les deux limites et interpole à mieux que 2% entre :

$$\mu(n_1) = \hbar\omega_\perp(\sqrt{1 + 4n_1a} - 1) \quad (4.7)$$

Pour décrire la transition du régime de champ moyen 1D au gaz de Tonks-Girardeau, nous utilisons le modèle de Lieb-Liniger [86] du gaz de bosons 1D avec interactions répulsives $g_1\delta(z)$. Lieb et Liniger ont donné la solution exacte de ce modèle quelque soit $g_1 > 0$ en utilisant l'ansatz de Bethe. L'énergie par particule est obtenue sous la forme d'une équation intégrale. Cette équation permet d'obtenir le potentiel chimique et montre qu'il est une fonction universelle de n_1a_1 que l'on doit évaluer numériquement. Menotti et Stringari [18] ont calculé cette équation d'état et nous ont donné accès à leurs résultats [95]. Dans la suite, nous utilisons leurs données.

Dans le paragraphe suivant, nous décrivons l'hydrodynamique du gaz de Bose 1D.

4.2 Hydrodynamique

L'hydrodynamique des fluides décrit les excitations de grande longueur d'onde et de basse fréquence dans les systèmes macroscopiques à température finie ou nulle [96]. Elle découle des lois de conservation générales et d'autres propriétés de symétrie du système. Il est très difficile d'en donner une démonstration microscopique dans le cas général. Une exception est le cas du gaz dilué non-dégénéré où les équations hydrodynamiques usuelles sont obtenues à partir de l'équation cinétique de Boltzmann en faisant un développement de Chapman-Enskog (voir

Réf. [44] par exemple). En effet, dans le régime hydrodynamique, où $\omega\tau \ll 1$ et $kl \ll 1$ (τ est le temps entre collisions, l est le libre parcours moyen et ω^{-1} (resp. k^{-1}) est une échelle de temps (resp. de longueur) typique sur laquelle les grandeurs macroscopiques caractéristiques du système évoluent), on dispose d'un petit paramètre, de l'ordre kl , ce qui permet de faire un développement. L'ordre zéro mène à l'hydrodynamique d'Euler, le premier ordre à l'hydrodynamique de Navier-Stokes, le deuxième à l'hydrodynamique de Burnett, etc.

Sous leur forme générale, les équations de l'hydrodynamique du fluide parfait, ou hydrodynamique d'Euler, à $T = 0$ s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) &= 0 \\ m \frac{d\mathbf{v}}{dt} &\simeq -\nabla(\mu(n) + V) \end{aligned} \quad (4.8)$$

où $\mu(n)$ est l'équation d'état du fluide homogène, n la densité locale, $\mathbf{v}$ le champ de vitesse et V un potentiel extérieur, comme un potentiel de piégeage par exemple. La première équation est exacte : c'est l'équation de conservation du nombre de particules ou équation de continuité. La deuxième équation est approchée : c'est l'équation d'Euler de conservation de la quantité de mouvement. Ces équations décrivent les fluides dans lesquels les effets thermiques et la dissipation sont négligeables. A température nulle ou presque nulle, ces équations sont valables pour décrire les superfluides de Bose ou de Fermi [97], le liquide de Fermi normal, dans le régime hydrodynamique uniquement [98], et les fluides de Bose ou de Fermi 1D, sans gap dans le spectre d'excitation, i.e. les liquides de Luttinger [99]. Dans le cas particulier du gaz de Bose 3D à $T = 0$, il est instructif de retrouver les équations de l'hydrodynamique à partir de l'équation de Gross-Pitaevskii du condensat de Bose-Einstein [16]. Sur cet exemple, on voit explicitement la nécessité d'étudier un système méso- ou macroscopique (i.e. tel que $N \gg 1$, où N est le nombre total de particules) pour pouvoir négliger le terme de pression quantique et retrouver l'hydrodynamique du fluide parfait [91].

Nous remarquons que les équations hydrodynamiques nécessitent de connaître l'équation d'état du fluide homogène $\mu(n)$. Elles ne supposent cependant pas la validité de l'approximation du champ moyen et peuvent donc être utilisées pour décrire les systèmes fortement interagissants, en utilisant l'équation d'état comme donnée d'entrée. Dans la suite, nous utilisons les équations (4.8) pour obtenir les modes hydrodynamiques du gaz de Bose 1D à partir de son équation d'état $\mu(n_1)$.

4.3 Modes hydrodynamiques : modèles exactement solubles

Dans ce paragraphe nous étudions les modes hydrodynamiques, c'est-à-dire les petites fluctuations autour de l'équilibre, du gaz de Bose décrit dans le paragraphe

4.1. Nous rappelons la méthode développée par Combescot et Leyronas [17] (CL). Elle consiste essentiellement à remplacer l'équation d'état exacte $\mu(n_1)$ par une équation d'état approchée dont les modes hydrodynamiques peuvent être obtenus analytiquement.

L'hydrodynamique du gaz de Bose 1D à $T = 0$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \partial_t n_1 + \partial_z(n_1 v) &= 0 \\ m \frac{dv}{dt} &\simeq -\partial_z(\mu(n_1) + V(r)) \end{aligned} \quad (4.9)$$

où $r \equiv |z|$. A l'équilibre, la densité locale $n_{1eq}(r)$ vérifie :

$$\mu(n_{1eq}(r)) + V(r) = \tilde{\mu} \quad (4.10)$$

où $\tilde{\mu}$ est la valeur constante sur tout le système du potentiel chimique global. En particulier, $\tilde{\mu}$ est égale à la valeur du potentiel de piégeage à la surface du nuage atomique (nous prenons $\mu(n_1 = 0) = 0$). Pour une petite fluctuation de densité $\delta n_1(z, t) = n_1(z, t) - n_{1eq}(r)$, nous définissons la petite fluctuation de potentiel chimique global :

$$w(z, t) = \tilde{\mu}(z, t) - \tilde{\mu} = \mu(n_1(z, t)) - \mu(n_{1eq}(r)) = (\partial\mu/\partial n_{1eq})\delta n_1(z, t) \quad (4.11)$$

En supposant que cette petite fluctuation se produit à la pulsation ω , on obtient $i\omega\delta n_1 = \partial_z(n_{1eq}v) = n_{1eq}\partial_z v + v\partial_z n_{1eq}$ qui avec l'équation d'Euler $i\omega m v = \partial_z w$ donne :

$$n_{1eq}\partial_z^2 w + \partial_z n_{1eq}\partial_z w + m\omega^2(\partial n_{1eq}/\partial\mu)w = 0 \quad (4.12)$$

La relation d'équilibre $\mu(n_{1eq}(r)) + V(r) = \tilde{\mu}$ implique $(\partial\mu/\partial n_{1eq})(\partial n_{1eq}/\partial r) = -V'(r)$. On obtient alors :

$$rw'' + rL'(r)w' - \frac{m\omega^2 r}{V'(r)}L'(r)w = 0 \quad (4.13)$$

où nous avons défini $L(r) = \ln(n_{1eq}(r))$ avec $L'(r) = dL/dr$. Nous posons $w(r) = r^l v(r)$, avec $l = 0$ pour un mode pair en z et $l = 1$ pour un mode impair, et obtenons alors :

$$rv'' + [2l + rL'(r)]v' - \left[\frac{m\omega^2 r}{V'(r)} - l\right]L'(r)v = 0 \quad (4.14)$$

Nous utilisons à présent le fait que le piège est harmonique $V(r) = m\omega_z r^2/2$ pour aboutir à :

$$rv'' + [2l + rL'(r)]v' - (\nu^2 - l)L'(r)v = 0 \quad (4.15)$$

avec $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$. Cette équation est invariante d'échelle si le même changement d'échelle est naturellement fait sur $L(r)$. En particulier, elle est invariante sous la transformation $r \rightarrow r/R$, avec R le rayon du nuage, de telle sorte que nous pouvons prendre ce rayon égale à 1. Plus généralement, le changement de variable $y = r^\alpha$ permet de modifier les constantes dans l'équation (4.15). On obtient :

$$y \frac{d^2 v}{dy^2} + \left(\Delta + y \frac{dL}{dy} \right) \frac{dv}{dy} - \frac{\nu^2 - l}{\alpha} \frac{dL}{dy} v = 0 \quad (4.16)$$

où $\Delta = 1 + \frac{2l-1}{\alpha}$. Finalement, nous remarquons que L' ne change pas si la densité $n_1(r)$ est multipliée par une constante. L'échelle absolue de densité disparaît donc et nous définissons la densité réduite $\bar{n}(r) \equiv n_1(r)/n_1(0)$. De la même façon, nous définissons le potentiel chimique local normalisé $\bar{\mu}(r) \equiv \mu(n_1(r))/\mu(n_1(0))$ où $\mu(n_1(0))$ est relié au rayon du nuage atomique R par $\mu(n_1(0)) = m\omega_z^2 R^2/2$. Ceci conduit à $\bar{\mu} = 1 - r^2$, lorsque r est exprimé en unités de R .

La méthode de CL [17] consiste à remplacer l'équation d'état exacte qui intervient dans L par une équation d'état approchée ou modèle pour laquelle l'équation (4.16) est soluble analytiquement. Par exemple, lorsqu'on prend le modèle $dL/dy = -p/(1-y)$, l'équation (4.16) se réduit à l'équation différentielle hypergéométrique :

$$y(1-y) \frac{d^2 v}{dy^2} + [\Delta - y(p + \Delta)] \frac{dv}{dy} + p \frac{\nu^2 - l}{\alpha} v = 0 \quad (4.17)$$

La solution générale de cette équation [100], régulière pour $y = 0$, est la fonction hypergéométrique $F(a, b; \Delta; y)$, avec a et b définis par $a + b = p + \Delta - 1$ et $ab = -p \frac{\nu^2 - l}{\alpha}$. La condition limite [17] à la surface du nuage atomique $y = 1$ implique la condition supplémentaire $a = -n$ où n est un entier strictement positif. Dans ce cas la solution est un polynôme. Nous obtenons alors les fréquences des modes propres :

$$\nu^2 = \frac{\omega^2}{\omega_z^2} = l + \frac{\alpha}{p} n (n + p + \Delta - 1) \quad (4.18)$$

En particulier, le mode que nous considérons dans la suite correspond à $l = 0$ et $n = 1$, la solution est simplement $v = (p + \Delta)y - \Delta$, avec la fréquence :

$$\nu^2 = \alpha + \frac{\alpha - 1}{p} \quad (4.19)$$

C'est le mode de fréquence la plus basse. Il s'agit d'un mode de compression, ou de respiration, du gaz. Le modèle ci-dessus est appelé modèle $\alpha - p$. Il correspond au profil de densité à l'équilibre $\bar{n}(r) = (1 - r^\alpha)^p$ qui résulte de la relation $\bar{\mu} = 1 - (1 - \bar{n}^{1/p})^{2/\alpha}$. En particulier le cas $\alpha = 2$ correspond à la loi de puissance $\bar{\mu} = \bar{n}^{1/p}$. Les trois régimes limites du gaz de Bose 1D, i.e. cigare 3D, champ moyen

1D et Tonks-Girardeau, satisfont ce type de dépendance entre le potentiel chimique et la densité 1D [18], avec les valeurs respectives $p = 2$, $p = 1$ et $p = 1/2$. Nous obtenons les résultats suivants pour les modes pairs ($l = 0$) :

$$\nu^2 = 2n + \frac{n}{p}(2n - 1) \quad (4.20)$$

et

$$\nu^2 = (1 + \frac{n}{p})(2n + 1) \quad (4.21)$$

pour les modes impairs ($l = 1$). Dans ce dernier cas $n = 0$ correspond au “mode dipole” (i.e. à l’oscillation globale du gaz dans le piège) et $\omega = \omega_z$ comme l’exige le théorème de Kohn [101]. Ces résultats sont en accord avec ceux de MS.

En plus du modèle $\alpha - p$ considéré ci-dessus, CL ont trouvé une classe de solutions quasi-polynomiales $v(y)$ pour des modèles plus complexes (i.e. avec plus de paramètres que le modèle $\alpha - p$). Ces quasi-polynômes sont des séries qui convergent très rapidement. En pratique ils se comportent comme des polynômes, i.e. qu’on peut sans risque tronquer la série à partir d’un certain ordre, car la variable y est restreinte à $0 \leq y \leq 1$. Les modèles correspondants sont $dL/dy = -\sum_{k=0}^K p_k y^k / (1-y)$ et peuvent être vus comme un développement de $(1-y)dL/dy$ en série entière de y autour de $y = 0$. Ils ont en général $K + 1$ paramètres, en plus du paramètre α . Dans la suite, nous utilisons le modèle $K = 1$ ($K = 0$ est le modèle $\alpha - p$) qui a trois paramètres α , p_0 et p_1 . Ce modèle est appelé modèle quasi-polynomial à 3 paramètres. Il est solution de :

$$y(1-y)\frac{d^2v}{dy^2} + (q_2y^2 + q_1y + q_0)\frac{dv}{dy} + (r_1y + r_0)v = 0 \quad (4.22)$$

avec $q_2 = -p_1$, $q_1 = -(\Delta + p_0)$, $q_0 = \Delta$, $r_1 = p_1 \frac{\nu^2 - l}{\alpha}$ and $r_0 = p_0 \frac{\nu^2 - l}{\alpha}$. La solution $v = \sum_{n=0}^N a_n y^n$ doit vérifier la relation de récurrence entre les a_n ’s qui résulte de l’équation (4.22), voir Réf. [17]. De plus, on impose que $a_{N+1} = 0$ ce qui permet de déterminer la fréquence au carré du mode ν^2 . La coupure N est choisie suffisamment grande pour que la convergence soit excellente et suffisamment petite pour le temps de calcul ne soit pas prohibitif. Dans nos calculs numériques nous utilisons $N = 10$.

Les équations d’état modèles que nous considérons possèdent soit 2 soit 3 paramètres. La procédure de détermination de la fréquence d’un mode consiste : (i) à trouver le jeu de paramètre qui donne une équation d’état modèle aussi proche de l’équation d’état exacte que possible ; (ii) à calculer la fréquence du mode à partir de ce jeu de paramètre, avec l’équation (4.18) pour le modèle $\alpha - p$ par exemple. Dans la Réf. [30], nous discutons de différentes définitions de la “proximité” de l’équation d’état modèle à l’équation d’état exacte, c’est-à-dire de différents estimateurs à minimiser pour trouver le meilleur jeu de paramètres. La conclusion de cette étude est que le choix d’un estimateur n’est pas crucial *si* on corrige la fréquence obtenue par une théorie des perturbations au premier ordre.

4.4 Correction au premier ordre

Nous considérons ici la possibilité de corriger au premier ordre de la théorie des perturbations la petite différence entre notre évaluation de la fréquence avec le modèle $L_0(r)$ (qui est soit le modèle $\alpha - p$, soit le modèle quasi-polynomial à 3 paramètres) et la fréquence correspondant au véritable $L(r)$. On peut faire cela de manière commode en transformant l'équation (4.16) en une équation de type Schrödinger, grâce au changement de fonction $\psi(y) = v(y)(y^\Delta n_0(y))^{1/2}$ qui conduit à :

$$-\frac{d^2\psi}{dy^2} + V(y)\psi = 0 \quad (4.23)$$

avec le potentiel effectif :

$$V(y) = \frac{1}{2}L'' + \frac{1}{4}L'^2 + \left(\frac{\nu^2 - l}{\alpha} + \frac{\Delta}{2}\right)\frac{L'}{y} + \frac{\Delta(\Delta - 2)}{4y^2} \quad (4.24)$$

L'équation (4.24) est une équation de Schrödinger à énergie nulle et $\hbar^2/2m = 1$. Une petite variation $\delta L = L - L_0$ implique une variation du potentiel effectif $V(y)$ qui implique une modification de l'énergie calculable au premier ordre de la théorie des perturbations usuelle. Pour rester à énergie nulle après correction, il faut faire varier la fréquence au carré d'une quantité $\delta\nu^2$ qui est juste la correction que nous cherchons à obtenir. De manière explicite, nous obtenons :

$$\int_0^1 dy \left[\frac{1}{2}\delta L'' + \frac{1}{2}L'\delta L' + \left(\frac{\nu^2 - l}{\alpha} + \frac{\Delta}{2}\right)\frac{\delta L'}{y} + \frac{\delta\nu^2}{\alpha}\frac{L'}{y} \right] \psi^2 = 0 \quad (4.25)$$

Le terme en $\delta L''$ peut être intégré par parties. Nous utilisons la relation $L = n'_0/n_0$ et écrivons $\psi(y)$ en fonction de $v(y)$ pour obtenir finalement :

$$\frac{\delta\nu^2}{\alpha} \int_0^1 dy (-n'_0) y^{\Delta-1} v^2 = \int_0^1 dy \delta L' n_0 y^{\Delta-1} v \left[\frac{\nu^2 - l}{\alpha} v - yv' \right] \quad (4.26)$$

Dans la suite nous utilisons cette formule pour corriger la fréquence du mode obtenue soit par le modèle $\alpha - p$ soit par le modèle quasi-polynomial à 3 paramètres : $\nu_{corr}^2 = \nu^2 + \delta\nu^2$.

4.5 Modes hydrodynamiques du gaz de Bose 1D piégé

Nous appliquons à présent la méthode développée dans les deux paragraphes précédents au calcul du mode de fréquence la plus basse ($n = 1, l = 0$) du gaz de Bose 1D décrit dans le paragraphe 4.1. La donnée d'entrée nécessaire à ce calcul

est l'équation d'état $\mu(n_1)$ pour le gaz 1D homogène. Nous procédons de la façon suivante : pour chaque valeur de $n_1(0)a$ (ou de $n_1(0)a_1$), nous ajustons un modèle (soit $\alpha - p$, soit quasi-polynomial à 3 paramètres) à l'équation d'état exacte en minimisant un estimateur de type χ^2 – pour plus de détails concernant la procédure de minimisation, voir la Réf. [30] ; la fréquence du mode à l'ordre zéro est calculée en insérant le jeu de paramètre obtenu par minimisation dans la formule donnant la fréquence du mode pour le modèle (équation (4.18) pour le modèle $\alpha - p$, par exemple) ; nous calculons ensuite la correction à ce résultat au premier ordre de la théorie des perturbations avec la formule (4.26).

Nous commençons par comparer les différents modèles utilisés pour calculer le carré de la fréquence réduite $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$. La Fig. 4.1 représente ν^2 en fonction de $n_1(0)a$ pour un système où $a_\perp/a = 100$. Quatre courbes sont dessinées. Elles correspondent au modèle $\alpha - p$, au modèle quasi-polynomial et aux mêmes modèles corrigés au premier ordre. En réalité, le modèle quasi-polynomial à 3 paramètres n'est utilisé qu'avec deux paramètres en fixant $\alpha = 2$. Nous avons vérifié qu'il n'y a pas de différence significative entre utiliser les trois paramètres ou seulement deux en fixant $\alpha = 2$, alors qu'il est beaucoup plus rapide et facile de ne manipuler que deux paramètres. Ceci n'est pas trivial, comme le montre le cas du gaz de Fermi 3D attractif traité dans les Réfs. [17, 30], où fixer $\alpha = 2$ n'est pas un bon choix.

Le nombre de points calculés est beaucoup plus grand entre le régime cigare 3D et le régime de champ moyen 1D (domaine de haute densité) qu'entre le régime de champ moyen 1D et le régime de Tonks-Girardeau (domaine de basse densité). Ceci est une simple conséquence du fait que nous utilisons une équation d'état analytique dans le premier domaine (4.7), alors que dans le deuxième domaine nous utilisons les données numériques de MS. Le fait d'avoir un ensemble de points fixes pour l'équation d'état implique que le calcul d'intégrales nécessaire pour obtenir la correction $\delta\nu^2$ est plus difficile, car nous devons alors utiliser une méthode d'intégration numérique primitive et que, par conséquent, nous sommes limités sur la précision et le nombre de points que nous pouvons calculer de manière sûre. La mauvaise jonction entre les domaines de haute densité et de basse densité dans la région du régime de champ moyen 1D est une conséquence de la valeur finie prise pour $a_\perp/a$ plutôt que la limite $a_\perp/a \rightarrow \infty$. Menotti et Stringari ont mis en avant que le régime de champ moyen 1D ne peut être identifié que lorsque $a_\perp/a \gg 1$.

Pour comparer nos différents calculs, nous prenons comme référence le modèle quasi-polynomial corrigé. Nous attendons qu'il donne le meilleur résultat et qu'il ait une grande précision, ce que montre l'étude du gaz de Fermi 3D attractif. La différence entre cette référence et les trois autres calculs ($\alpha - p$, quasi-polynomial et $\alpha - p$ corrigé) est représentée dans la Fig. 4.2. Nous remarquons, qu'une fois corrigés, les résultats des modèles $\alpha - p$ et quasi-polynomial sont en très bon accord. De plus, leur accord absolu est au niveau de 10^{-3} pour ν^2 .

Le modèle $\alpha - p$ est exact dans les trois régimes limites : $\alpha = 2$ et $p = 2$ dans le régime cigare 3D, ce qui donne $\nu^2 = 5/2$; $\alpha = 2$ et $p = 1$ dans le régime de

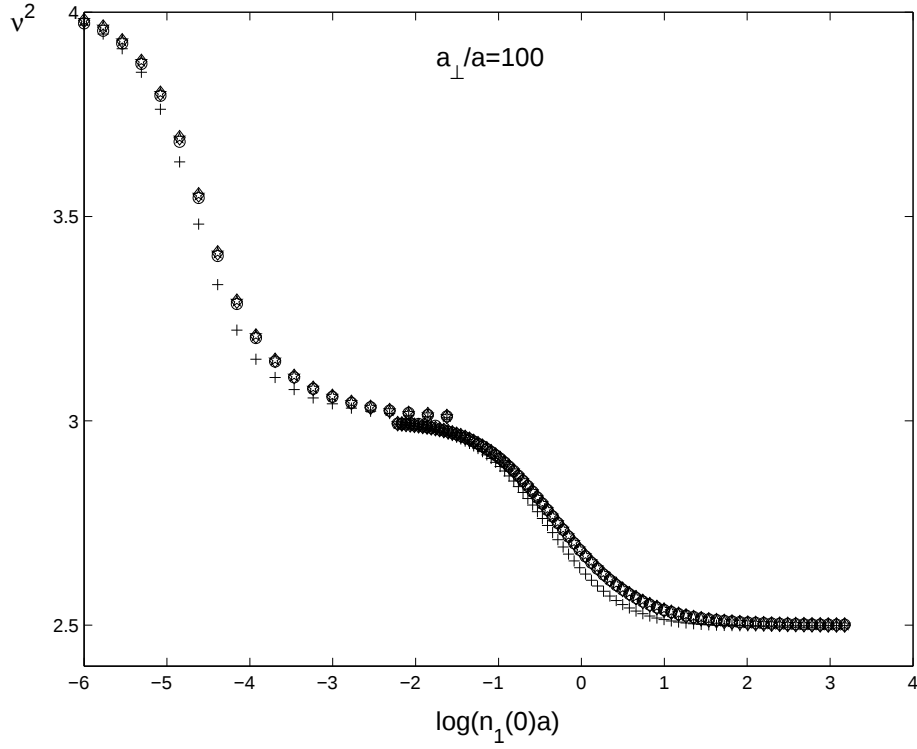


FIG. 4.1 – Mode de fréquence la plus basse du gaz de Bose 1D piégé avec $a_{\perp}/a = 100$. Le carré de la fréquence du mode $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ est représenté en fonction de $\log(n_1(0)a)$. Les croix (+) correspondent au modèle $\alpha-p$; les étoiles (★) au modèle $\alpha-p$ corrigé; les cercles (○) au modèle quasi-polynomial; et les diamants (◇) au modèle quasi-polynomial corrigé.

champ moyen 1D, d'où $\nu^2 = 3$; et $\alpha = 2$ et $p = 1/2$ dans le régime de Tonks-Girardeau, ce qui donne $\nu^2 = 4$. Entre ces limites, on voit sur les Fig. 4.1 et 4.2 que le modèle $\alpha - p$ a des difficultés à prédire la valeur correcte de la fréquence. C'est cette constatation qui nous a initialement poussé à utiliser le modèle quasi-polynomial et à développer la méthode de correction au premier ordre. On peut comprendre cette difficulté de la façon suivante : dans le domaine de haute densité, pour les grandes valeurs de $n_1(0)a$, le potentiel chimique est essentiellement donné par $\mu \sim n_1^{1/2}$ pour la plus grande partie du domaine de variation de n_1 . Alors que pour les petites valeurs de n_1 (aux bords du nuage) cette dépendance devient $\mu \sim n_1$. Ce changement de comportement analytique est difficile à suivre pour le modèle $\alpha - p$ qui n'a que deux paramètres, ce qui explique les résultats peu satisfaisants constatés.

Pour les modèles $\alpha - p$ et quasi-polynomial, on obtient de bien meilleurs résultats en utilisant une expression analytique de l'équation d'état (domaine de haute densité) plutôt que des données numériques (domaine de basse densité), comme le montre la Fig. 4.2. Cependant, les modèles corrigés s'accordent au même niveau de précision dans les deux domaines.

Nous comparons à présent nos résultats avec ceux de MS [18], qui utilisent une méthode de règle de somme [91] pour obtenir une borne supérieure à la fréquence du mode de plus basse fréquence. Nous commençons par étudier le domaine de haute densité. Menotti et Stringari ont calculé ν^2 comme fonction de $Naa_\perp/a_z^2$, où $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ est la longueur d'oscillateur axiale et N est le nombre d'atomes. Nous calculons la même quantité en fonction de $n_1(0)a$ qui est une fonction croissante de $Naa_\perp/a_z^2$. Obtenir la relation entre ces deux nombres revient à trouver le profil de densité normalisé. Ceci peut être fait analytiquement dans les deux régimes limites [18] et numériquement entre. Le détail de ce calcul est donné dans l'appendice 4.7. Nous pouvons alors représenter les résultats de MS et du modèle quasi-polynomial corrigé, que nous pensons être le plus précis de nos résultats, sur la même figure, voir Fig. 4.3. On voit que l'accord est excellent, au niveau de 10^{-2} . Nous ne pouvons espérer un meilleur accord car nous avons utilisé une équation d'état analytique approchée qui ne reproduit l'équation d'état exacte qu'à l'ordre du %. Ceci se manifeste à très haute densité ($n_1(0)a > 1$) dans le fait que le modèle quasi-polynomial corrigé semble prédire des valeurs de la fréquence plus grandes que celles de MS. Ceci serait en contradiction avec le fait qu'ils utilisent une approche de règle de somme connue pour être une borne supérieure exacte [91].

Pour tester notre méthode, nous calculons aussi les fréquences attendues pour deux expériences. Nous utilisons dans ce cas l'équation d'état exacte, c'est-à-dire la solution numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii 3D [95]. Pour l'expérience du MIT [13], où $n_1(0)a = 0.22$, nous obtenons $\nu^2 = 2.845 \pm 0.003$ et $\nu^2 = 2.911 \pm 0.002$ pour l'expérience de l'ENS [14], où $n_1(0)a = 0.10$. Ceci est en très bon accord avec les résultats obtenus par MS [18] : $\nu^2 = 2.85$ et $\nu^2 = 2.91$. Pour le calcul de $n_1(0)a$,

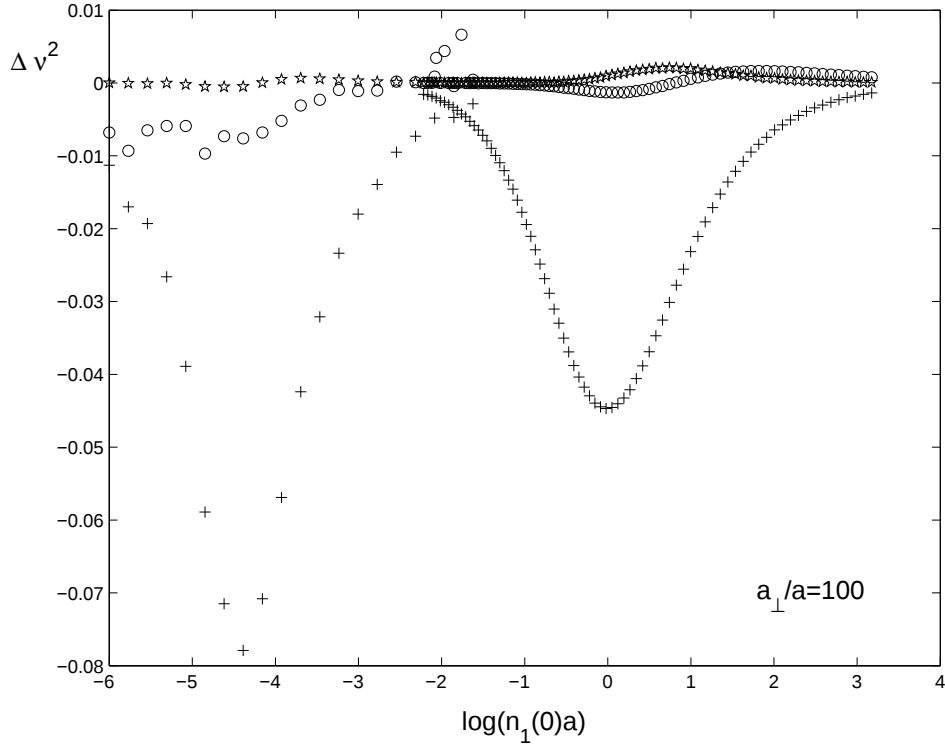


FIG. 4.2 – Mode de fréquence la plus basse du gaz de Bose 1D piégé avec $a_{\perp}/a = 100$. Le carré de la fréquence du mode $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ calculé avec le modèle quasi-polynomial est pris comme référence. La différence entre cette référence et trois autres calculs ($\alpha - p$, $\alpha - p$ corrigé et quasi-polynomial) est représentée en fonction de $\log(n_1(0)a)$. Les croix (+) correspondent au modèle $\alpha - p$; les étoiles (★) au modèle $\alpha - p$ corrigé; et les cercles (o) au modèle quasi-polynomial.

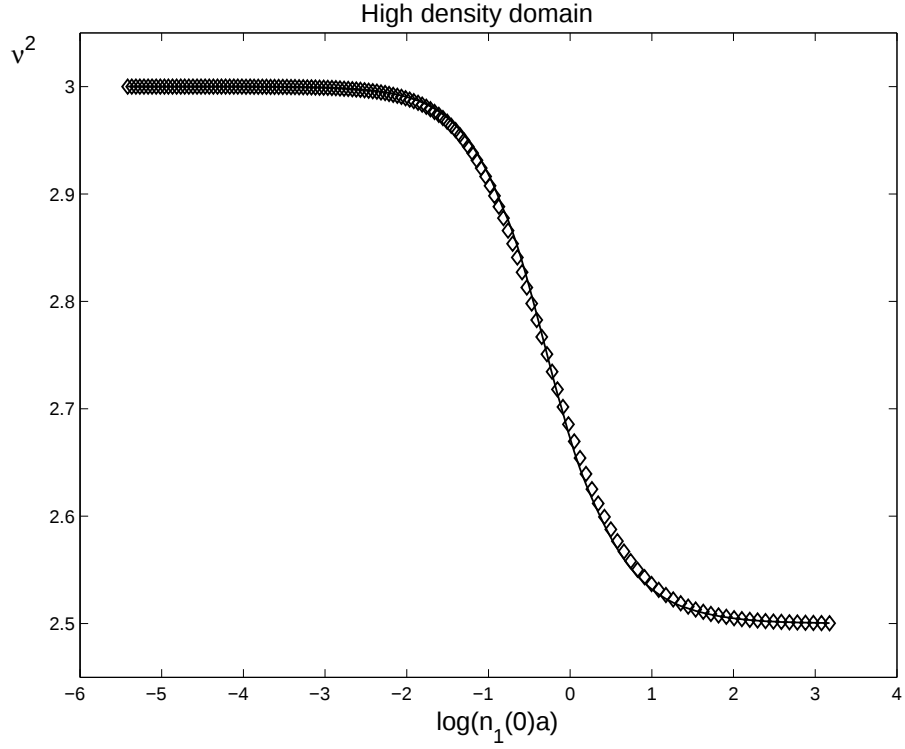


FIG. 4.3 – Mode de fréquence la plus basse du gaz de Bose 1D piégé dans le domaine de haute densité (“high density domain” en anglais). Le carré de la fréquence du mode $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ est représenté en fonction de $\log(n_1(0)a)$. Les diamants (◇) correspondent au modèle quasi-polynomial corrigé. Le trait plein est le résultat de Menotti et Stringari [18].

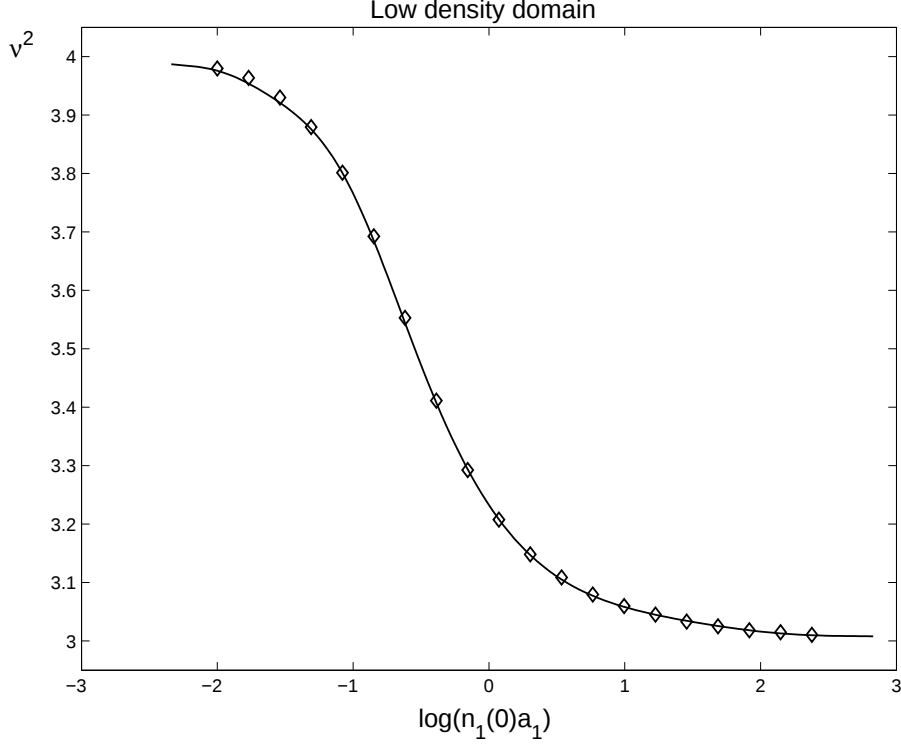


FIG. 4.4 – Mode de fréquence la plus basse du gaz de Bose 1D piégé dans le domaine de basse densité (“low density domain” en anglais). Le carré de la fréquence du mode $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ est représenté en fonction de $\log(n_1(0)a)$. Les diamants ($\diamond$) correspondent au modèle quasi-polynomial corrigé. Le trait plein est le résultat de Menotti et Stringari [18].

voir l’appendice 4.7.

Nous considérons finalement le domaine de basse densité. Comme dans le domaine de haute densité, nous devons relier la variable sans dimension que nous utilisons $n_1(0)a_1$ à Na_1^2/a_z^2 utilisé dans la Réf. [18]. Ceci est fait analytiquement dans les deux régimes limites (champ moyen 1D et Tonks-Girardeau) [18] et numériquement entre. La fréquence du mode obtenue avec le modèle quasi-polynomial corrigé et celle calculée par MS sont représentées dans la Fig. 4.4. L’accord est à nouveau très bon.

Les résultats de MS sont en très bon accord avec nos résultats sur toute la gamme de densité $n_1(0)a$. Dans le cas étudié ici, la méthode de règle de somme [91] semble ne pas seulement donner une borne supérieure mais quasiment le résultat exact. Ceci est lié au fait que le profil de densité au centre du piège a une dépendance quadratique en r [102]. En d’autres termes, le paramètre α est toujours très proche de 2. Ceci n’est pas toujours vrai. Ainsi dans le cas du gaz de Fermi 3D attractif à proximité de l’effondrement (“collapse” en anglais), la dépendance

devient linéaire et $\alpha = 1$ [17, 30].

4.6 Conclusion

L'étude des modes hydrodynamiques du gaz de Bose 1D piégé présentée ci-dessus montre que la méthode de Combescot et Leyronas est applicable à des systèmes fortement interagissants. De plus, elle permet d'obtenir tous les modes hydrodynamiques et pas seulement celui de fréquence la plus basse (bien qu'ici notre étude se soit limitée à ce mode). Nous insistons aussi sur le fait que la méthode de CL permet le calcul des modes avec une précision aussi grande que voulue et en tout cas bien plus grandes que les précisions expérimentales actuelles. Ceci vient de la flexibilité de la méthode : on peut utiliser des modèles avec un très grand nombre de paramètres (modèle $\alpha - p$ à 2 paramètres ; modèle quasi-polynomial à 3, 4, ... paramètres) et ensuite corriger la différence avec l'équation d'état exacte en utilisant la théorie des perturbations usuelle à l'ordre voulu. Dans le cas du gaz de Bose 1D, nous avons utilisé les modèles à 2 et 3 paramètres et corrigé au premier ordre de la théorie des perturbations, ce qui est déjà suffisant pour obtenir une précision absolue de l'ordre 10^{-3} sur le carré de la fréquence réduite ν^2 .

Une autre utilisation possible de la méthode de Combescot et Leyronas est l'obtention d'informations sur l'équation d'état d'un système dont l'étude théorique s'avère difficile, à partir de mesures expérimentales des fréquences des modes hydrodynamiques. On peut en effet imaginer d'inverser la procédure décrite dans ce chapitre pour obtenir des formules analytiques approchées pour l'équation d'état d'un gaz piégé étudié expérimentalement.

Notre travail montre également que l'approche de règle de somme employée par Menotti et Stringari donne de très bons résultats dans le cas du gaz de Bose 1D.

Concernant les possibilités expérimentales d'étude du gaz de Bose 1D, nous confirmons l'utilité de l'étude et de la mesure des modes hydrodynamiques pour identifier le régime atteint. Actuellement, les expériences les plus avancées se situent dans le domaine de haute densité, à mi-chemin entre le régime cigare 3D et le régime champ moyen 1D [13, 14, 15]. Le régime de champ moyen 1D est très proche d'être atteint expérimentalement, mais celui de Tonks-Girardeau ne semble pas à la portée immédiate des expériences.

4.7 Appendice : Profil de densité

Dans cet appendice, nous expliquons comment calculer le profil de densité à l'équilibre $n_1(z)$ du gaz de Bose 1D à partir de l'équation d'état $\mu(n_1)$. Ce calcul est présenté pour le domaine de haute densité (i.e. entre les régime cigare 3D et champ moyen 1D) où nous utilisons l'équation d'état analytique approchée (4.7).

Le calcul ne pose pas de problème avec une équation d'état connue numériquement et il se fait donc de la même manière dans le domaine de basse densité (i.e. entre les régimes champ moyen 1D et Tonks-Girardeau). Le calcul du profil de densité permet immédiatement d'obtenir le lien entre le paramètre sans dimension $Naa_{\perp}/a_z^2$ utilisé par MS et celui que nous utilisons $n_1(0)a$.

A l'équilibre, la densité locale $n_1(z)$ vérifie :

$$\mu(n_1(z)) + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 = \tilde{\mu} = \frac{1}{2}m\omega_z^2 R^2 \quad (4.27)$$

où R est le rayon du nuage atomique. Il est à déterminer à partir de l'équation de normalisation de la densité locale :

$$N = \int_{-R}^R dz n_1(z) \quad (4.28)$$

où N est le nombre total d'atomes piégés. De la première équation (4.27), on obtient :

$$n_1(z)a = \frac{1}{4} \left[\left(1 + \frac{m\omega_z^2 R^2}{2\hbar\omega_{\perp}} \left(1 - \frac{z^2}{R^2} \right) \right)^2 - 1 \right] \quad (4.29)$$

On injecte alors cette relation dans l'équation de normalisation (4.28) pour aboutir à :

$$X^5 + 5X^3 - 15 \frac{Naa_{\perp}}{a_z^2} = 0 \quad (4.30)$$

polynôme du 5^{ème} degré en $X \equiv a_{\perp}R/a_z^2$. On reconnaît dans cette dernière équation le paramètre sans dimension de MS ($Naa_{\perp}/a_z^2$). La procédure consiste ensuite à choisir une valeur de ce paramètre sans dimension et à trouver un zéro du polynôme (4.30) à proximité de X d'ordre 1. En injectant ce résultat dans l'équation (4.27), on obtient le profil de densité $n_1(z)$ pour une valeur particulière du paramètre sans dimension $Naa_{\perp}/a_z^2$. Le paramètre sans dimension que nous utilisons $n_1(0)a$ s'obtient facilement :

$$n_1(0)a = \frac{X^2}{4} \left(1 + \frac{X^2}{4} \right) \quad (4.31)$$

Dans le cas de l'expérience de l'ENS [14], $Naa_{\perp}/a_z^2 \simeq 0.08$ et la solution de l'équation (4.30) est $X \simeq 0.6069$, d'où $n_1(0)a \simeq 0.10$. Pour celle du MIT [13], $Naa_{\perp}/a_z^2 \simeq 0.24$ et donc $X \simeq 0.8563$, d'où $n_1(0)a \simeq 0.22$.

Dans le régime cigare 3D où $m\omega_z^2 R^2 \gg \hbar\omega_{\perp}$, on obtient les formules analytiques suivantes :

$$\begin{aligned} R &= \frac{a_z^2}{a_{\perp}} \left(\frac{15Naa_{\perp}}{a_z^2} \right)^{1/5} \\ n_1(z)a &= \frac{1}{16} \left(\frac{15Naa_{\perp}}{a_z^2} \right)^{4/5} \left(1 - \frac{z^2}{R^2} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.32)$$

Ces formules ont déjà été obtenus par MS [18]. Dans le régime champ moyen 1D où $m\omega_z^2 R^2 \ll \hbar\omega_\perp$, on trouve :

$$\begin{aligned} R &= \frac{a_z^2}{a_\perp} \left(\frac{3Na a_\perp}{a_z^2} \right)^{1/3} \\ n_1(z)a &= \frac{1}{4} \left(\frac{3Na a_\perp}{a_z^2} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{z^2}{R^2} \right) \end{aligned} \tag{4.33}$$

Résultats déjà obtenus par MS [18].

Deuxième partie

Propriétés d'équilibre des gaz froids denses

Dans cette deuxième partie, nous étudions les propriétés d'équilibre des gaz froids denses et plus particulièrement le développement en agrégats de l'équation d'état. Le premier chapitre concerne les gaz froids dilués et propose une revue du développement en agrégats en mécanique classique (travaux de Ursell, Yvon et Mayer) puis en mécanique quantique (méthode des opérateurs d'Ursell, travaux de Grüter, Holzmann et Laloë). Le deuxième chapitre étudie le développement en agrégats pour les systèmes denses. En mécanique classique, les résultats de Mayer sont détaillés avant d'être réobtenus par une autre méthode. Cette dernière est ensuite généralisée au cas quantique. Le premier chapitre ainsi que le début du deuxième détaillent des résultats classiques, mais pas nécessairement familiers, qui sont nécessaires à la compréhension de la généralisation à la mécanique statistique quantique des systèmes denses. Les annexes traitent de quelques applications de la méthode des opérateurs d'Ursell : étude de la statistique des cycles d'échange dans un condensat de Bose-Einstein et son lien avec la fraction condensée ; tentative d'étude de la transition superfluide d'un gaz de Fermi attractif.

Chapitre 5

Développement en agrégats dans les gaz dilués

Les propriétés d'équilibre macroscopiques d'un système classique ou quantique sont entièrement contenues dans la fonction de partition. Cette fonction, qui peut être vue comme une fonction génératrice, est l'objet principal de la mécanique statistique à l'équilibre. Par exemple, dans l'étude d'un gaz atomique interagissant, la fonction de partition permet d'obtenir l'équation d'état. Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux gaz dilués. L'approche que nous utilisons pour calculer la fonction de partition est la théorie du développement en agrégats ("cluster expansion" en anglais), dont l'idée principale est de développer la fonction de partition suivant un petit paramètre qui mesure la dilution du gaz. Cette technique ne nécessite pas de supposer que les interactions sont faibles, mais uniquement que la portée du potentiel interatomique est courte en comparaison de la distance moyenne entre atomes. Ceci permet de s'affranchir de problèmes rencontrés lorsqu'on utilise la théorie des perturbations, qui suppose, elle, la dilution vis à vis de l'intensité des interactions.

Nous débutons ce chapitre par le rappel du développement en agrégats en mécanique classique. Cette théorie est principalement l'oeuvre d'Ursell [103], d'Yvon [104] et surtout de Mayer [19], qui a introduit la représentation diagrammatique du développement en agrégats. Le développement en agrégats de la fonction de partition permet d'obtenir l'équation d'état d'un fluide classique sous forme paramétrique : une première équation donne la pression en fonction d'un paramètre z appelé fugacité et une deuxième donne la densité en fonction du même paramètre. En éliminant la fugacité terme à terme entre ces deux équations, on obtient le développement du Viriel de l'équation d'état. La théorie classique du développement en agrégats est décrite en détail dans les livres de Mayer et Goeppert Mayer [19], de Uhlenbeck et Ford [31], de Huang [44] et de Hansen et McDonald [105].

Dans la suite, nous présentons la généralisation du développement en agrégats à la mécanique quantique, en utilisant la méthode des opérateurs d'Ursell développée par Grüter et Laloë [20, 106]. Cette méthode utilise le formalisme de la

première quantification afin de séparer les effets des interactions des effets de la statistique quantique. Ceci conduit à introduire, en plus des opérateurs d'Ursell qui traitent des interactions, des opérateurs de cycle d'échange qui prennent en charge la statistique bosonique ou fermionique des atomes.

Ce chapitre sert principalement d'introduction détaillée au problème que nous abordons dans le chapitre suivant : le développement en agrégats pour les systèmes quantiques denses.

5.1 Mécanique classique

5.1.1 Fonction de Mayer

L'idée principale du développement en agrégats est la suivante. On définit une fonction qui dépend de la distance relative de deux particules appelée fonction de Mayer. Elle possède les deux propriétés fondamentales d'être bornée quelle que soit la distance relative entre les particules (et donc d'être intégrable en 0) et de s'annuler lorsque les deux particules sont plus éloignées que la portée microscopique du potentiel d'interaction. On écrit alors la fonction de partition exacte du système comme une intégrale de la somme de produits de fonctions de Mayer. En intégrant terme à terme, on montre que la fonction de partition s'écrit comme un développement en puissances décroissantes du volume $\mathcal{V}$ du système. Si le gaz est dilué, il suffit de se limiter aux premiers ordres du développement car il y a très rarement des situations où plus de deux ou trois particules sont proches. Ces idées sont précisées dans la suite.

Nous considérons un système classique de particules de masse m contenues dans une boîte de volume fini $\mathcal{V}$, avec des conditions aux bords périodiques (système invariant par translation). Le Hamiltonien du système est la somme des énergies cinétiques de chaque particule et des énergies d'interactions entre paires de particules :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j} V_{ij} \quad (5.1)$$

Le potentiel d'interaction de paire $V_{ij} = V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ est central. Ce potentiel est typiquement un potentiel interatomique avec un coeur dur à courte distance et une partie attractive de type Van der Waals à grande distance (voir Fig. 5.1). On note b la portée microscopique du potentiel, i.e. la distance entre particules à partir de laquelle l'énergie potentielle d'interaction est négligeable devant les autres énergies pertinentes du problème (telles que l'énergie cinétique moyenne par particule, etc.). Le gaz est dilué si la distance moyenne entre particules est beaucoup plus petite que la portée du potentiel. Ceci se traduit par :

$$\rho b^3 \ll 1 \quad (5.2)$$

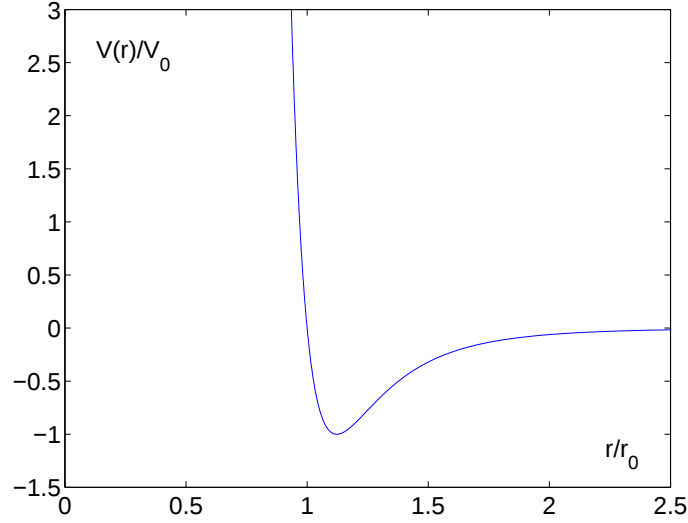


FIG. 5.1 – Un modèle de potentiel interatomique usuel : le potentiel (12,6) de Lennard-Jones $V(r)/V_0 = 4((r_0/r)^{12} - (r_0/r)^6)$. La distance r est donnée en unité de la taille du coeur dur r_0 , l'énergie d'interaction est donnée en unité de la profondeur du puits d'attraction V_0 .

où ρ est la densité numérique de particules du gaz.

Nous considérons l'ensemble grand canonique de température $T = 1/k_B\beta$, de volume $\mathcal{V}$ et de fugacité $z = e^{\beta\mu}$ où μ est le potentiel chimique. Soit $Z_{gc}(\beta, \mathcal{V}, z)$ la fonction de partition grand canonique. Elle s'écrit :

$$Z_{gc}(\beta, \mathcal{V}, z) = \sum_{N=0}^{+\infty} z^N Z_{can}(\beta, \mathcal{V}, N) \quad (5.3)$$

où

$$Z_{can}(\beta, \mathcal{V}, N) = \frac{1}{\lambda_T^{3N} N!} \int d^{3N}r \exp\left(-\beta \sum_{i<j} V_{ij}\right) \quad (5.4)$$

est la fonction de partition canonique du système de N particules et $\lambda_T \equiv \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m}$ est la longueur d'onde thermique de de Broglie. On définit la fonction de Mayer f_{ij} par :

$$f(r_{ij}) = f_{ij} \equiv \exp(-\beta V_{ij}) - 1 \quad (5.5)$$

Pour un potentiel interatomique usuel, cette fonction est partout bornée et s'annule ou devient négligeable quand la distance entre les particules i et j est plus grande que la portée du potentiel d'interaction (voir Fig. 5.2). La portée du potentiel est donc la distance à partir de laquelle l'énergie d'interaction est négligeable devant l'énergie cinétique par particule $\sim k_B T$.

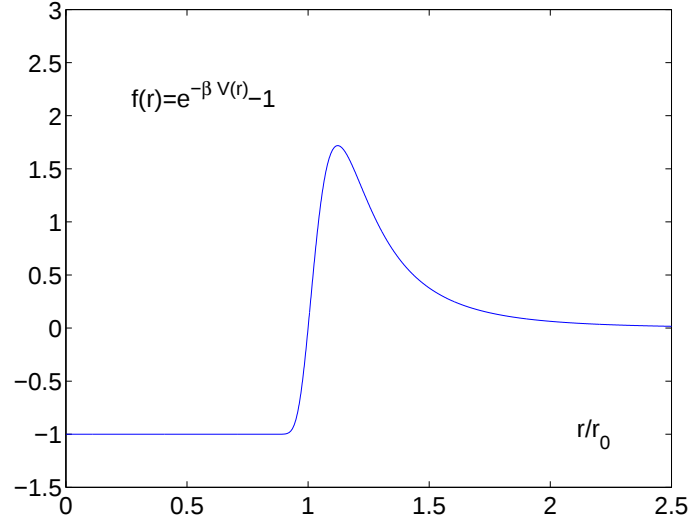


FIG. 5.2 – Fonction de Mayer $f(r) = e^{-\beta V(r)} - 1$ pour le potentiel (12,6) de Lennard-Jones de la Fig. 5.1, avec $\beta V_0 = 1$. Ici, la portée du potentiel $b \sim 2r_0$.

5.1.2 Développement diagrammatique

Mayer a réussi à obtenir une expression particulièrement simple de la fonction de partition grand canonique. L'idée est de développer la fonction de partition canonique comme suit :

$$\begin{aligned} e^{-\beta \sum_{i < j} V_{ij}} &= \prod_{i < j} (1 + f_{ij}) \\ &= 1 + (f_{12} + f_{13} + \dots) + (f_{12}f_{13} + f_{12}f_{23} + \dots) + \dots \end{aligned} \quad (5.6)$$

Il est utile de représenter chaque terme de ce développement par un diagramme. Un *diagramme à N particules* est formé de N points numérotés qui représentent les N particules et de lignes entre les paires de particules $\{i, j\}$ liées par une fonction de Mayer f_{ij} . On écrit alors symboliquement :

$$Z_{can}(\beta, \mathcal{V}, N) = \text{somme de tous les diagrammes à } N \text{ particules} \quad (5.7)$$

Lorsqu'on détaille les premiers termes de la somme précédente (voir Réf. [108], par exemple), on constate que la fonction de partition divisée par la fonction de partition du gaz parfait s'écrit comme une série entière de petit paramètre $\rho \int d^3r f(r) \sim \rho b^3 \ll 1$:

$$Z_{can}(\beta, \mathcal{V}, N) = Z_{can}^{gp}(\beta, \mathcal{V}, N) \times \left(1 + \frac{N-1}{2} \rho \int d^3r f(r) + \dots \right) \quad (5.8)$$

où $Z_{can}^{gp} = \mathcal{V}^N / N! \lambda_T^{3N}$ est la fonction de partition du gaz parfait.

En général les diagrammes à N particules ne sont pas connectés. Un diagramme est dit *connecté* lorsqu'on peut aller de n'importe quel point du diagramme à n'importe quel autre en suivant les liens. Une grande simplification se produit lorsqu'on ne considère que des diagrammes connectés (ces derniers sont définis plus précisément dans la suite et sont appelés *diagrammes d'agrégat*) : la fonction de partition *grand canonique* s'écrit comme l'exponentielle de la somme des diagrammes d'agrégat. Cette propriété d'exponentiation des diagrammes connectés est un résultat général que l'on retrouve dans la plupart des expansions diagrammatiques et qui est connu sous le nom de théorème des diagrammes connectés ("linked cluster theorem" en anglais) [31, 44].

Le développement en agrégats classique est le développement du logarithme de la fonction de partition grand canonique en série entière de la fugacité z . Il s'écrit :

$$\frac{\ln Z_{gc}}{\mathcal{V}} = \sum_{l=1}^{\infty} b_l(T, \mathcal{V}) \left(\frac{z}{\lambda_T^3} \right)^l \quad (5.9)$$

où les intégrales d'agrégat ("cluster integrals" en anglais) $b_l(T, \mathcal{V})$ sont définies en suivant les conventions de Mayer et Goeppert Mayer [19]. Les premières sont données par :

$$b_1(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{1!\mathcal{V}} \int d^3r_1 = 1 \quad (5.10)$$

$$b_2(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{2!\mathcal{V}} \int d^3r_1 d^3r_2 f_{12} = \frac{1}{2!} \int d^3r_{12} f(r_{12}) \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} b_3(T, \mathcal{V}) = & \frac{1}{3!\mathcal{V}} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 [f_{12}f_{13} + f_{12}f_{23} + \\ & + f_{13}f_{23} + f_{12}f_{13}f_{23}] \end{aligned} \quad (5.12)$$

et ainsi de suite pour $l \geq 4$. Ces définitions comportent un facteur $1/\mathcal{V}$ de telle sorte que les intégrales d'agrégat $b_l(T, \mathcal{V})$ restent finies quand le volume tend vers l'infini (limite thermodynamique). C'est une conséquence de la portée b finie du potentiel d'interaction. Il est utile de définir des diagrammes pour représenter ces intégrales. Un *diagramme d'agrégat* de l particules est formé de l points numérotés qui représentent l particules et de liens entre des paires distinctes de particules. Les liens représentent les fonctions de Mayer f_{ij} . Les diagrammes d'agrégat sont connectés par définition. En termes de diagrammes, la définition générale des intégrales d'agrégat est :

$$b_l(T, \mathcal{V}) \equiv \frac{1}{l!\mathcal{V}} \times \text{somme de tous les diagrammes d'agrégat à } l \text{ particules} \quad (5.13)$$

Par exemple :

$$b_1(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{1!\mathcal{V}} (\bullet) = 1 \quad (5.14)$$

$$b_2(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{2!\mathcal{V}} (\bullet \text{---} \bullet) \quad (5.15)$$

et :

$$b_3(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{3!\mathcal{V}} \left(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagup \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagdown \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} \right) \quad (5.16)$$

5.1.3 Equation d'état : premiers ordres du développement du Viriel

L'équation d'état paramétrique s'obtient facilement à partir du développement en série entière de z de la fonction de partition grand canonique (5.9). Elle est constituée de l'équation donnant la pression p en fonction de z

$$\beta p = \frac{\ln Z_{gc}}{\mathcal{V}} = \sum_{l=1}^{\infty} b_l(T, \mathcal{V}) \left(\frac{z}{\lambda_T^3} \right)^l \quad (5.17)$$

et de celle donnant la densité ρ en fonction de z :

$$\rho = \frac{\langle N \rangle}{\mathcal{V}} = z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\ln Z_{gc}}{\mathcal{V}} \right) = \sum_{l=1}^{\infty} l b_l(T, \mathcal{V}) \left(\frac{z}{\lambda_T^3} \right)^l \quad (5.18)$$

Les équations (5.17) et (5.18) montrent que la pression et la densité s'écrivent comme des séries entières de la fugacité z . Les coefficients des séries font intervenir les intégrales d'agrégat. Les termes en z^l ont des coefficients qui ne font intervenir que les diagrammes d'agrégat formés de l particules. Ces diagrammes sont non nuls seulement si les particules forment un agrégat, i.e. si elles sont toutes proches les unes des autres. C'est la propriété d'agrégat ("cluster property" en anglais). Dans un gaz dilué, la fugacité z tend vers zéro et la somme des séries entières en z peut être remplacée par la somme des premiers termes seulement. Par exemple, si on ne retient que le premier terme des séries, on obtient

$$\beta p \simeq \frac{z}{\lambda_T^3} \simeq \rho \quad (5.19)$$

qui est l'équation d'état du gaz parfait. De manière générale, pour un gaz dilué, on peut remplacer les intégrales d'agrégat par leur limite thermodynamique ¹. On définit alors :

$$\bar{b}_l(T) = \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} b_l(T, \mathcal{V}) \quad (5.20)$$

¹Yang et Lee [107] ont montré qu'intervertir $\lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty}$ et $\sum_{l=1}^{\infty}$ n'est valide que dans la phase gazeuse. Pour décrire la transition gaz-liquide, il faut prendre la limite thermodynamique en dernier.

En limitant le développement en fugacité aux premiers ordres dans (5.9) et (5.18), on peut éliminer z et obtenir les premiers ordres du développement du Viriel de l'équation d'état :

$$\frac{\beta p}{\rho} = 1 + B(T)\rho + C(T)\rho^2 + \dots \quad (5.21)$$

avec

$$\begin{aligned} B(T) &= -\bar{b}_2(T) \\ C(T) &= 4\bar{b}_2(T)^2 - 2\bar{b}_3(T) \\ &\dots \end{aligned} \quad (5.22)$$

Pour une démonstration pédagogique de l'obtention des premiers coefficients du Viriel dans l'ensemble canonique voir Mullin [108].

5.2 Mécanique quantique

Nous passons maintenant à l'étude du gaz dilué en mécanique quantique. Un développement en agrégats en mécanique statistique quantique a été proposé par Kahn et Uhlenbeck [109]. Il permet de traiter le cas du gaz dilué en généralisant la définition des intégrales d'agrégat b_l , mais se prête mal à une extension aux systèmes denses. Lee et Yang [110] ont développé une méthode basée sur celle de Kahn et Uhlenbeck. Ils se réfèrent à un système auxiliaire de particules vérifiant la statistique de Boltzmann pour traiter le gaz de Bose ou de Fermi et font une approximation de collisions binaires ("binary collision approximation" en anglais). Cette méthode qui permet d'obtenir un développement en agrégats en mécanique quantique pour le gaz dilué n'a pas été étendue au cas du gaz dense. Dans l'objectif d'étudier les systèmes denses, nous nous appuyons sur la méthode de Grüter et Laloë [20, 106, 111] basée sur l'utilisation des opérateurs d'Ursell. Bien que proche de celle de Lee et Yang, la méthode des opérateurs d'Ursell est plus compacte et plus facile à manipuler. Dans ce paragraphe, nous rappelons cette méthode dans le cas du gaz dilué et dégénéré [20, 106, 111]. La généralisation au cas des systèmes denses [26] est présentée dans le chapitre suivant et constitue la principale contribution de notre travail.

5.2.1 Opérateurs d'Ursell et opérateurs de cycle d'échange

Le Hamiltonien du système de N particules est maintenant un opérateur :

$$H_N = \sum_{i=1}^N H_1(i) + \sum_{i<j} V_{ij} \quad (5.23)$$

où $H_1(i)$ est le Hamiltonien à une particule (somme de l'énergie cinétique et éventuellement d'un potentiel extérieur) et le potentiel d'interaction de paire est

$V_{ij} = V(r_{ij})$. La fonction de partition canonique s'écrit :

$$Z_{can}(\beta, \mathcal{V}, N) = Tr_{1,...,N} \left\{ S_N \exp(-\beta H_N) \right\} \quad (5.24)$$

où S_N est l'opérateur de symétrisation ou d'antisymétrisation (à N particules) suivant que les particules sont des bosons ou des fermions. La trace se fait sur toutes les particules numérotées de 1 à N . Nous utilisons le formalisme de la première quantification pour pouvoir séparer les effets de la statistique des effets des interactions. Nous voulons obtenir le développement en agrégats de la fonction de partition grand canonique, i.e. l'équivalent quantique de l'équation (5.9). Pour cela, nous définissons les opérateurs d'Ursell [106] :

$$\begin{aligned} U_1(1) &= \exp[-\beta H_1(1)] \\ U_2(1, 2) &= \exp[-\beta (H_1(1) + H_1(2) + V_{12})] - U_1(1)U_1(2) \\ U_3(1, 2, 3) &= \exp[-\beta (H_1(1) + H_1(2) + H_1(3) + V_{12} + V_{13} + V_{23})] \\ &\quad - U_2(1, 2)U_1(3) - U_2(2, 3)U_1(1) - U_2(3, 1)U_1(2) \\ &\quad - U_1(1)U_1(2)U_1(3) \\ &\quad \dots \end{aligned} \quad (5.25)$$

Tous les opérateurs d'Ursell U_l pour $l \geq 2$ vérifient une propriété d'agrégat. Par exemple, les éléments de matrice diagonaux $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | U_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle$ tendent vers zéro dès que la distance $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ devient plus grande qu'une distance microscopique ; en d'autres termes, les éléments de matrice du même opérateur en représentation d'impulsion sont inversement proportionnels au volume du système. On note que connaître exactement l'opérateur d'Ursell U_l revient à résoudre le problème à l corps en mécanique quantique. A l'heure actuelle, on ne sait résoudre exactement que le problème à deux corps.

Nous écrivons l'opérateur exponentiel de l'Hamiltonien de la façon suivante :

$$e^{-\beta H_N} = \sum_{\{m'_l\}} \sum_{\{D\}} \underbrace{U_1(\cdot) \dots U_1(\cdot)}_{m'_1 \text{ facteurs}} \times \underbrace{U_2(\cdot, \cdot) \dots U_2(\cdot, \cdot)}_{m'_2 \text{ facteurs}} \times \dots \times \underbrace{U_N(\cdot, \dots, \cdot)}_{m'_N \text{ facteurs}} \quad (5.26)$$

La première somme correspond à toutes les manières différentes de décomposer un ensemble de N particules en m'_l groupes ou cycles de l particules tel que :

$$N = \sum_{l=1}^N l m'_l \quad (5.27)$$

La deuxième correspond à toutes les manières différentes de distribuer les numéros 1 à N dans les opérateurs d'Ursell. Cette écriture découle directement de la définition des opérateurs d'Ursell (5.25). Pour $N = 3$, par exemple :

$$\begin{aligned} e^{-\beta H_3(1,2,3)} &= U_3(1, 2, 3) \\ &\quad + U_2(1, 2)U_1(3) + U_2(2, 3)U_1(1) + U_2(3, 1)U_1(2) \\ &\quad + U_1(1)U_1(2)U_1(3) \end{aligned} \quad (5.28)$$

Le premier terme correspond à $m'_3 = 1$; les trois suivants à $m'_2 = 1$ et $m'_1 = 1$; et le dernier à $m'_1 = 3$.

On peut décomposer S_N de manière similaire. L'opérateur de symétrisation/antisymétrisation s'écrit :

$$S_N = \frac{1}{N!} \sum_{\{\alpha\}} \eta^{\text{par}_\alpha} P_\alpha \quad (5.29)$$

où les P_α sont les opérateurs de permutation, $\eta = +1$ (resp. $\eta = -1$) pour des bosons (resp. des fermions) et $\text{par}_\alpha = 1$ (resp. $\text{par}_\alpha = -1$) si la permutation P_α est paire (resp. impaire). Toute permutation se décompose de manière unique en produit de cycles. Ceci permet d'écrire :

$$S_N = \sum_{\{m_l\}} \sum_{\{D\}} \underbrace{C_1(.) \dots C_1(.)}_{m_1 \text{ facteurs}} \times \eta^{m_2} \underbrace{C_2(.,.) \dots C_2(.,.)}_{m_2 \text{ facteurs}} \times \dots \quad (5.30)$$

où les C_l sont les opérateurs de cycle d'échange.

5.2.2 Développement diagrammatique

En injectant les expressions (5.26) et (5.30) dans la définition de la fonction de partition canonique (5.24), on obtient une expression simple de la fonction de partition grand canonique comme somme de diagrammes [20, 106] :

$$\ln Z_{gc}(\beta, \mathcal{V}, z) = \sum_{diag} z^{n_{diag}} f_{diag} \Gamma_{diag} \quad (5.31)$$

La somme porte sur tous les diagrammes connectés dont nous allons brièvement décrire la construction. Un diagramme qui contribue à $\ln Z_{gc}$ est formé d'un nombre n_{diag} de particules. Chaque particule est représentée par un trait horizontal — et correspond à U_1 . Les particules forment un agrégat (i.e. que le diagramme est connecté). Elles sont liées soit par des cycles d'échange ("C-clusters" en anglais) soit par des opérateurs d'Ursell ("U-clusters" en anglais). Le premier type de lien résulte de la statistique, le deuxième des interactions ; l'opérateur d'Ursell $U_2(i, j)$ est l'équivalent quantique de la fonction de Mayer f_{ij} . Lorsque les particules sont liées par un cycle d'échange elles sont dessinées horizontalement à la suite les unes des autres. Des particules liées par un opérateur d'Ursell sont dessinées les unes au-dessus des autres avec deux traits verticaux pour un opérateur U_2 , trois pour un opérateur U_3 , etc. :

$$U_2(1, 2) \leftrightarrow \text{II} \quad ; \quad U_3(1, 2, 3) \leftrightarrow \text{III} \quad (5.32)$$

Γ_{diag} est la valeur numérique associée à un diagramme et est obtenue en traçant sur toutes les particules contenues dans le diagramme ; f_{diag} est un facteur de comptage

et z est la fugacité. Par exemple, pour un gaz de Boltzmann, en l'absence de cycles d'échange [109, 110, 106] :

$$\begin{aligned}\ln Z_{g.c.} &= \text{---} + \frac{1}{2!} \times \text{---} \text{---} + \frac{1}{3!} \times \text{---} \text{---} \text{---} + \dots \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l!} \text{Tr}_{1,2,\dots,l} \{U_l(1, 2, \dots, l)\}\end{aligned}\quad (5.33)$$

C'est l'équivalent quantique, pour le gaz de Boltzmann, du développement en agrégats de l'équation (5.9). A partir de là, on peut définir les intégrales d'agrégat b_l , obtenir l'équation d'état paramétrique (5.17,5.18) et éliminer z terme à terme pour obtenir les premiers ordres du développement du Viriel (5.22). Il est formellement possible de faire la même chose pour le gaz de Bose ou de Fermi et donc d'obtenir la fonction de partition grand canonique exacte. Dans ce cas, $\ln Z_{gc}$ est donné par la somme de tous les diagrammes d'agrégat dont les liens sont soit des cycles d'échange ("C-clusters") soit des opérateurs d'Ursell ("U-clusters"). Le calcul peut être mené analytiquement jusqu'à obtenir le deuxième coefficient du Viriel [106] et retrouver le résultat exact de Beth-Uhlenbeck [63]. Des corrections de dégénérescence à ce résultat sont également obtenues analytiquement dans la même référence.

Dans la pratique, il est plus facile de travailler avec l'opérateur densité à un corps dans l'ensemble grand canonique $\rho_I(1)$ qu'avec la fonction de partition grand canonique $\ln Z_{gc}$. Cet opérateur est défini par :

$$\rho_I(1) = \frac{1}{Z_{gc}} \sum_{N=0}^{\infty} z^N N \text{Tr}_{2,\dots,N} \{e^{-\beta H_N(1,2,\dots,N)}\} \quad (5.34)$$

de telle sorte que sa trace donne le nombre moyen de particules $\langle N \rangle$. Un développement diagrammatique proche de celui de $\ln Z_{gc}$ a été obtenu par Grüter, Holzmann et Laloë [111, 112]. Ils montrent que l'opérateur densité à un corps s'écrit :

$$\rho_I(1) = \sum_{\text{diag } \rho} z^{n_\rho} g_\rho \Gamma_\rho(1) \quad (5.35)$$

Γ_ρ est la valeur numérique associée à un diagramme de ρ_I et est obtenue en traçant sur toutes les particules contenues dans le diagramme sauf la particule numéro 1 : c'est donc un opérateur dans l'espace à une particule. Le facteur de comptage est noté g_ρ : il est en général plus simple que dans le cas de $\ln Z_{gc}$. Par exemple, pour le gaz de Boltzmann :

$$\begin{aligned}\rho_I(1) &= zU_1(1) + z^2 \text{Tr}_2 \{U_2(1, 2)\} \\ &+ \frac{z^3}{2!} \text{Tr}_{2,3} \{U_3(1, 2, 3)\} + \dots\end{aligned}\quad (5.36)$$

La particule numéro 1 est marquée et pour cette raison, elle joue un rôle particulier. Le terme générique du développement précédent est :

$$\frac{z^l}{(l-1)!} Tr_{2,3,\dots,l} \{U_l(1, 2, 3, \dots, l)\} \quad (5.37)$$

avec un poids, ou facteur de comptage, $1/(l-1)!$ correspondant aux distributions équivalentes des particules non marquées $(2, \dots, N)$. Dans la représentation diagrammatique usuelle des opérateurs d'Ursell [111, 112], l'équation (5.36) est :

$$\rho_I(1) = \text{---} + \text{---} + \frac{1}{2!} \times \text{---} + \dots \quad (5.38)$$

Pour se familiariser avec ces diagrammes, nous donnons encore l'exemple du gaz parfait de Bose ou de Fermi qui ne contient pas d'opérateurs d'Ursell $l \geq 2$ mais uniquement des cycles d'échange :

$$\begin{aligned} \rho_I(1) &= \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots \\ &= zU_1(1)[1 + \eta zU_1(1) + (\eta zU_1(1))^2 + \dots] \\ &= \frac{zU_1(1)}{1 - \eta zU_1(1)} = f_I(1) \end{aligned} \quad (5.39)$$

Le cas général du gaz de Bose ou de Fermi en interaction est donné par l'équation (5.34). Comme on ne peut tenir compte de tous les diagrammes, on choisit souvent une ou plusieurs classes particulières, dont on pense que l'effet physique est dominant pour telle ou telle propriété. Un type de développement est par exemple :

$$\begin{aligned} \rho_I &= f_1 + \text{---} + \text{---} \\ &+ \text{---} + \text{---} + \text{---} \\ &+ \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots \end{aligned} \quad (5.40)$$

où f_I est l'opérateur densité à un corps du gaz parfait, voir équation (5.39).

Chapitre 6

Développement en agrégats dans les gaz denses

Le chapitre précédent a permis de détailler la théorie du développement en agrégats d'un gaz dilué. En mécanique classique, le développement se fait en puissances du petit paramètre ρb^3 – où ρ est la densité d'atomes et b est la portée du potentiel interatomique – et peut donc être tronqué après les premiers ordres : il suffit de considérer les agrégats formés d'un petit nombre de particules. Pour le gaz quantique, il faut de plus supposer que le système est peu dégénéré $\rho \lambda_T^3 \ll 1$ – où λ_T est la longueur d'onde thermique de de Broglie – pour pouvoir interrompre le développement et ne pas tenir compte des cycles d'échange d'un grand nombre de particules.

Nous voulons à présent aborder le problème d'un gaz dense, ou plus généralement d'un système dense (i.e. éventuellement d'un liquide). Dans un tel système, le paramètre ρb^3 n'est pas petit. Si de plus, le système est froid, le paramètre $\rho \lambda_T^3$ devient lui aussi d'ordre un. Pour faire la mécanique statistique d'un tel système en utilisant un développement en agrégats, il est nécessaire de tenir compte des agrégats de toutes les tailles et on ne peut donc tronquer le développement.

En mécanique classique, Mayer a proposé une méthode de réorganisation du développement en agrégats qui permet de le simplifier considérablement et qui aboutit à l'équation d'état exacte du système dense : tous les coefficients du développement du Viriel sont calculables à partir de quelques intégrales de fonctions de Mayer. Nous présentons une méthode diagrammatique – dite des “diagrammes réductibles en arbre” – qui permet de retrouver les résultats de Mayer pour les systèmes denses. L'avantage de la méthode des diagrammes en arbre est qu'elle se généralise au cas quantique en utilisant le formalisme des opérateurs d'Ursell [26].

Nous commençons par rappeler la théorie de Mayer du développement en agrégats d'un système classique dense, avant de présenter la méthode des diagrammes en arbre. La généralisation à la mécanique quantique est exposée à la suite.

6.1 Mécanique classique

Nous revenons maintenant à la mécanique statistique classique et présentons la généralisation du développement en agrégats dans le cas d'un système dense dans lequel la condition $\rho b^3 \ll 1$ n'est pas nécessairement vérifiée. Ce travail qui est essentiellement l'oeuvre de Mayer est détaillé dans [19]. Les mêmes résultats peuvent être obtenus par une technique de dérivation fonctionnelle exposée dans le livre de Hansen et McDonald [105]. Van Kampen [113] a proposé une approche simplifiée de la théorie de Mayer qui ne nécessite pas de travailler dans l'ensemble grand canonique.

Dans ce paragraphe, nous commençons par rappeler brièvement les résultats obtenus par Mayer concernant l'équation d'état d'un système dense. Nous proposons ensuite une méthode diagrammatique qui permet de retrouver ces résultats et qui est généralisée dans la suite au cas quantique.

6.1.1 Equation d'état

Dans le chapitre 5.1 concernant le gaz classique dilué, nous avons défini les diagrammes d'agrégat. Ces diagrammes contiennent des informations redondantes. En effet, dès que $l \geq 3$, la plupart des diagrammes qui contribuent à b_l peuvent être construits comme des produits de diagrammes plus petits (déjà contenu dans $b_{l'}$ avec $l' < l$). C'est par exemple le cas de tous les diagrammes dans le membre de droite de l'équation (5.16), à l'exception du dernier. Il est alors utile de définir la notion d'irréductibilité : un agrégat *irréductible* est un agrégat tel que si un lien, i.e. essentiellement un b_2 , est retiré, l'agrégat ne se sépare jamais en deux¹. Au contraire, dans un agrégat *réductible*, il est possible de trouver au moins un lien tel que si on le retire, l'agrégat se scinde en deux. Comme un lien est essentiellement un b_2 , la réductibilité et l'irréductibilité sont définis ici par rapport aux coefficients binaires b_2 . Des définitions plus générales peuvent être envisagées.

Les *diagrammes d'agrégat irréductibles* jouent un rôle particulier dans les systèmes denses. Ils apparaissent lorsqu'on introduit une exponentiation du développement en fugacité de la densité (5.18). Nous définissons le décalage en énergie Δ , qui déplace tous les niveaux d'énergie à une particule $\mathbf{p}^2/2m$, par :

$$\rho \equiv \frac{z}{\lambda_T^3} e^{-\beta\Delta} = \int \frac{d^3p}{h^3} e^{-\beta(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \Delta - \mu)} \quad (6.1)$$

On peut montrer que Δ est donné par la série [114, 116] :

$$-\beta\Delta = \sum_{l=1}^{\infty} \beta_l(T, \mathcal{V}) \rho^l \quad (6.2)$$

¹Par définition, $\mathcal{V}\beta_1(T, \mathcal{V}) = \bullet\text{---}\bullet$.

où les nouveaux coefficients β_l sont définis par :

$$\beta_{l-1}(T, \mathcal{V}) \equiv \frac{1}{(l-1)!\mathcal{V}} \times \text{somme de tous les} \\ \text{diagrammes d'agrégat irréductibles à } l \text{ particules} \quad (6.3)$$

ou encore :

$$\beta_{l-1}(T, \mathcal{V}) \equiv l \times \text{partie irréductible de } b_l(T, \mathcal{V}) \quad (6.4)$$

Par exemple :

$$\beta_1(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{\mathcal{V}} (\bullet \text{---} \bullet) = \int d^3 r_{12} f(r_{12}) \quad (6.5)$$

et :

$$\beta_2(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{2!\mathcal{V}} \left(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} \right) \quad (6.6)$$

De plus, on peut montrer que les agrégats irréductibles sont directement liés à l'équation d'état à volume $\mathcal{V}$ fini en faisant disparaître la variable z dans l'équation d'état paramétrique :

$$\frac{\beta p}{\rho} = 1 - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{l}{l+1} \beta_l(T, \mathcal{V}) \rho^l \quad (6.7)$$

Ce résultat est démontré dans le livre de Mayer et Goeppert Mayer [114]. Une démonstration plus générale est obtenue par Uhlenbeck et Ford [31]. Ils montrent comment cette exponentiation des diagrammes d'agrégat irréductibles résulte, dans ce cas aussi², d'un théorème général de théorie des graphes. Van Kampen [113] obtient le même résultat que Mayer en se plaçant uniquement dans l'ensemble canonique. Dans le calcul de Mayer, la limite thermodynamique de volume infini est prise avant de faire la somme sur l . L'équation qui en résulte est appelée développement du Viriel de l'équation d'état :

$$\frac{\beta p}{\rho} = 1 - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{l}{l+1} \bar{\beta}_l(T) \rho^l \quad (6.8)$$

Yang et Lee [107] ont montré que prendre cette limite pour chaque coefficient de la série en fugacité réduit la validité des calculs à la phase gazeuse et ne permet donc pas de décrire la transition gaz-liquide, par exemple. Un excellent exposé du problème de la condensation gaz-liquide peut être trouvé dans le livre de Uhlenbeck et Ford [115].

²En effet, l'exponentiation des diagrammes d'agrégat ou diagrammes connectés du chapitre sur le gaz dilué est également un cas particulier d'un théorème général de théorie des graphes [31].

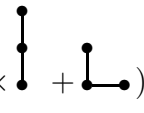
6.1.2 Diagrammes réductibles en arbre : champ moyen

Nous définissons une nouvelle classe de diagramme. Elle va fournir une manière alternative de retrouver les résultats précédents. Parmi tous les diagrammes d'agrégat qui contribuent à b_l , nous ne gardons que ceux qui contiennent $l-1$ liens. Ils correspondent aux diagrammes les moins connectés : si n'importe quel lien est retiré, ces diagrammes se séparent en deux. Ils ne sont pas seulement réductibles (dès que $l \geq 3$), mais aussi *complètement réductibles*, puisque retirer n'importe quel lien coupe le diagramme en deux. Par exemple, la partie complètement réductible de b_3 est :

$$b_3^R(T) = \frac{1}{3!\mathcal{V}} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 [f_{12}f_{13} + f_{12}f_{23} + f_{13}f_{23}] \quad (6.9)$$

Le dernier terme dans le membre de droite de (5.12) a été éliminé. Graphiquement, nous représentons ces agrégats par des diagrammes en forme d'arbre tels que celui de la Fig. 6.1. C'est pourquoi nous les appelons *diagrammes réductibles en arbre*.

Pour construire un tel diagramme en arbre, nous devons choisir une particule numérotée qui joue le rôle de “racine”, par exemple la particule 1. Ensuite, parmi toutes les particules j liées à la particule 1 par un lien f_{1j} , nous choisissons celle avec la plus petite valeur de j ; soit k cette particule. La même procédure est ensuite répétée à partir de la particule k : nous identifions la particule m à laquelle elle est reliée et qui a le numéro le plus petit et nous la plaçons à la suite dans la branche. La même opération est répétée jusqu'à ce que nous atteignons la fin de la première branche qui est dessinée verticalement par convention. Nous revenons ensuite le long de cette branche, en direction de la racine, et identifions la première particule qui est liée à une particule hors de la première branche. Cette particule est un point de branchement ou noeud de l'arbre : c'est la source d'une nouvelle branche que nous construisons comme la première branche et que nous dessinons immédiatement à droite de celle-ci. La même construction continue et nous ajoutons des branches successives qui sont dessinées dans l'ordre des aiguilles d'une montre à partir de leur source. Nous continuons jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de particules. Cette construction permet d'obtenir une géométrie bien définie pour les diagrammes en arbre. Cependant des diagrammes en arbre différents peuvent avoir la même valeur numérique³. Il est néanmoins utile, pour le raisonnement qui va suivre, de classer leur contribution suivant la structure de l'arbre. Par exemple, la partie réductible de b_3 devient :

$$b_3^R(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{3!} (2 \times \text{diagramme 1} + \text{diagramme 2}) \quad (6.10)$$


(à partir de maintenant, nous incluons le facteur $1/\mathcal{V}$ dans la valeur du diagramme en arbre, de façon à simplifier les notations).

³En fait la valeur de ces diagrammes ne dépend que du nombre de noeuds, i.e. du nombre l de particules. Ce résultat est démontré dans la suite.

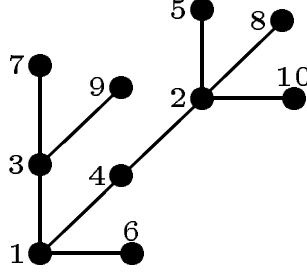


FIG. 6.1 – Un diagramme en arbre correspondant à un agrégat de 10 particules. L'arbre symbolise un des termes contenus dans la partie réductible en arbre de b_{10} . La méthode de construction des branches et la numérotation des particules sont expliqués dans le corps du texte.

Nous considérons à présent un certain diagramme en arbre et évaluons son facteur de comptage ou poids. Il s'agit de déterminer de combien de façons différentes on peut numéroter les particules d'un arbre tout en respectant les règles de construction détaillées plus haut. Supposons que nous donnions des numéros aléatoires aux $l-1$ noeuds de l'arbre. Ceci n'est acceptable que si à chaque bifurcation, les numéros des particules autour sont rangés en ordre croissant dans le sens des aiguilles d'une montre. Nous appelons $r_1, r_2, ..$ les facteurs de branchement ou de ramification des noeuds, i.e. le nombre de branches secondaires à chaque noeud. Un diagramme linéaire n'a que des facteurs de branchement $r = 1$, un diagramme avec une bifurcation binaire a un $r = 2$, et r prend les valeurs 3, 4, etc. quand plus de branches partent de la même source. Chaque noeud a donc une probabilité $1/r_i!$ d'être ordonné correctement. Comme il y a $(l-1)!$ façons de distribuer $l-1$ particules sur les noeuds, le résultat final est que le poids d'un diagramme en arbre est :

$$\frac{(l-1)!}{\prod_i r_i!} \quad (6.11)$$

Si nous appelons T_{diag} la valeur d'un diagramme en arbre (incluant le facteur $1/\mathcal{V}$), nous pouvons écrire l'agrégat réductible en arbre à l particules :

$$l! b_l^R(T) = \sum_{\{diag. en arbres\}} \frac{(l-1)!}{\prod_i (r_i)!} T_{diag}. \quad (6.12)$$

En insérant cette expression dans le développement en z de la densité (5.18), nous remarquons que plusieurs simplifications se produisent dans les coefficients et nous

obtenons :

$$\rho = \frac{z}{\lambda_T^3} \left\{ 1 + \frac{z/\lambda_T^3}{1!} \times \text{diagram}_1 + \frac{(z/\lambda_T^3)^2}{2!} \left(\frac{2!}{2!} \times \text{diagram}_2 + \frac{2!}{1!} \times \text{diagram}_3 \right) \right. \\ \left. + \dots + \frac{(z/\lambda_T^3)^{l-1}}{(l-1)!} \times \frac{(l-1)!}{\Pi_i(r_i)!} \times \text{diagram}_l + \dots \right\} \quad (6.13)$$

Il est maintenant possible de regrouper les diagrammes en fonction du facteur de branchement r_1 à leur racine :

$$\rho = \frac{z}{\lambda_T^3} \left\{ 1 + \frac{1}{1!} \left[\frac{z}{\lambda_T^3} \text{diagram}_1 + \left(\frac{z}{\lambda_T^3} \right)^2 \text{diagram}_2 + \left(\frac{z}{\lambda_T^3} \right)^3 \text{diagram}_3 + \dots \right] \right. \\ \left. + \frac{1}{2!} \left[\left(\frac{z}{\lambda_T^3} \right)^2 \text{diagram}_4 + \dots \right] + \dots \right\} \quad (6.14)$$

Nous remarquons alors une sorte de propriété d'auto-similarité du développement : à chaque noeud secondaire, nous obtenons un développement où apparaissent à nouveau tous les termes contenus dans ρ . D'où :

$$\rho = \frac{z}{\lambda_T^3} \left\{ 1 + \frac{1}{1!} \times \text{diagram}_1 + \frac{1}{2!} \times \text{diagram}_2 + \dots + \frac{1}{r_1!} \times \text{diagram}_{r_1} + \dots \right\} \quad (6.15)$$

Nous reconnaissons alors le développement d'une exponentielle :

$$\rho = \frac{z}{\lambda_T^3} \left\{ 1 + \beta_1 \rho + \frac{1}{2!} \times [\beta_1 \rho]^2 + \dots + \frac{1}{r_1!} \times [\beta_1 \rho]^{r_1} + \dots \right\}$$

où $\beta_1 = 2b_2$ est défini dans (6.5), et obtenons finalement le résultat très simple :

$$\rho = \frac{z}{\lambda_T^3} \exp(\beta_1 \rho) \quad (6.16)$$

ou encore :

$$-\beta \Delta = \beta_1 \rho \quad (6.17)$$

Ainsi, lorsque seuls les diagrammes réductibles en arbre sont considérés, le déplacement en énergie Δ est proportionnel à la densité. Nous retrouvons donc le résultat usuel de l'approximation du champ moyen. La méthode utilisée est différente de Mayer et Goeppert-Mayer [114] et de Uhlenbeck et Ford [116] : elle

découle des propriétés de branchement des diagrammes en arbre. De plus, comme nous le montrons plus loin, cette méthode se généralise à la mécanique quantique.

L'équation (6.17) peut évidemment être obtenue comme cas particulier des méthodes des Réfs. [114, 116]. Il suffit de supposer que la seule intégrale d'agrégat irréductible est β_1 . Dans ce cas, toutes les intégrales d'agrégat se réduisent à leur valeur réductible en arbre b_l^R . Ces dernières s'expriment uniquement en termes de $b_2 = \beta_1/2$. Pour montrer cela, nous considérons l'intégrale suivante associée à un diagramme en arbre à l particules :

$$T_{diag.} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_l f_{12} \dots f_{ij} \dots f_{kl} \quad (6.18)$$

Chaque fonction de Mayer qui apparaît dépend de la distance relative entre deux particules :

$$f_{ij} = f(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = f(r_{ij}) \quad (6.19)$$

Soit $\mathbf{x}_k$ le vecteur position relative de la particule k et de la particule précédente dans la branche commençant à la racine. Il y a $l - 1$ vecteurs $\mathbf{x}_k$, $k = 2$ à l . Nous remarquons que chaque fonction de Mayer dépend d'un $\mathbf{x}_k$, et que deux fonctions de Mayer dans le produit dépendent nécessairement de $\mathbf{x}_k$ différents. Soit

$$\mathbf{R} = \frac{1}{l} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \dots + \mathbf{r}_l) \quad (6.20)$$

le vecteur position du "centre de masse". Nous faisons alors le changement de variable suivant dans l'intégrale : de $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_l)$ à $(\mathbf{R}, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_l)$ et le Jacobien vaut un. Nous obtenons :

$$T_{diag.} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3R d^3x_2 \dots d^3x_l f(x_2) \dots f(x_l) \quad (6.21)$$

En intégrant sur la variable $\mathbf{R}$, nous faisons disparaître le facteur $1/\mathcal{V}$. Les $l - 1$ intégrales qui restent se séparent de telle sorte que :

$$T_{diag.} = \int d^3x_2 f(x_2) \dots \int d^3x_l f(x_l) = \left(\int d^3x f(x) \right)^{l-1} \quad (6.22)$$

Or l'intégrale de la fonction de Mayer est ce que nous appelons aussi la première intégrale d'agrégat irréductible β_1 . Nous obtenons donc :

$$T_{diag.} = (\beta_1)^{l-1} \quad (6.23)$$

On en déduit que la partie réductible de l'intégrale d'agrégat à l particules s'écrit :

$$b_l^R \equiv \frac{1}{l!} N_l \beta_1^{l-1} \quad (6.24)$$

où N_l est le nombre d'agrégats de l particules et $l - 1$ liens, i.e. le nombre de diagrammes en arbre contenant l particules :

$$N_l = \sum_{\{diag. en arbre\}} \frac{(l-1)!}{\prod_i (r_i)!} \quad (6.25)$$

Si nous insérons la valeur correspondante de b_l dans les équations (5.9) et (5.18), nous obtenons à nouveau le résultat (6.17). De plus l'équation (6.7) devient :

$$\frac{\beta p}{\rho} = 1 - \frac{1}{2}\beta_1(T, \mathcal{V}) \quad \rho = 1 - b_2(T, \mathcal{V}) \quad \rho \quad (6.26)$$

qui contient une correction linéaire en densité.

La technique des diagrammes en arbre se généralise en étendant la définition de la réductibilité/irréductibilité vis à vis de β_2 , β_3 , etc. Ceci permet de retrouver graphiquement le résultat (6.2).

6.1.3 Résumé

En guise de résumé sur la mécanique statistique classique, nous proposons le tableau suivant qui regroupe les différents résultats de la théorie du développement en agrégats du gaz classique. La colonne de gauche spécifie le type de diagrammes considérés et celle de droite la quantité qui s'écrit comme somme de ces diagrammes. Lorsqu'on passe d'une ligne du tableau à la suivante, le nombre de diagrammes possibles diminue grâce à des exponentiations successives.

diagrammes	somme des diagrammes
à N particules	Z_{can} , éq. (5.7)
d'agrégat	$\ln Z_{gc}$, éq. (5.17)
d'agrégat irréductibles	$\ln(\rho \lambda_T^3/z)$, éq. (6.1,6.2) et éq. d'état du Viriel (6.8)

6.2 Mécanique quantique

Nous abordons à présent le développement en agrégats d'un système dense en mécanique quantique [26]. L'objectif de ce travail est de trouver un équivalent quantique aux intégrales d'agrégat irréductibles β_l de la mécanique classique, i.e. de résoudre le problème de Kahn et Uhlenbeck qui remarquent à la fin de leur article de 1938 sur les agrégats quantiques [109] : «We have not been able to generalize this physical interpretation of the β_l to the quantum theory.». Nous commençons par traiter le cas d'un gaz de Boltzmann, c'est-à-dire que dans un premier temps nous ne considérons pas les cycles d'échange. Le cas de la statistique de Bose ou de Fermi est traité à la suite.

6.2.1 Statistique de Boltzmann

Dans ce paragraphe nous considérons un gaz de particules distinguables et ne tenons donc pas compte des cycles d'échange, i.e. qu'il n'y a pas d'opérateur de symétrisation ou d'antisymétrisation S_N . Nous rappelons, voir l'équation (5.36), que l'opérateur densité à un corps s'écrit alors :

$$\rho_I(1) = zU_1(1) + \sum_{l=2}^{\infty} \frac{z^l}{(l-1)!} \text{Tr}_{2,3,\dots,l} \{U_l(1, 2, 3, \dots, l)\} \quad (6.27)$$

Dans un système dense, il n'est pas justifié de tronquer la série en fugacité. Il est donc nécessaire de conserver les opérateurs d'Ursell U_l à tous les ordres $l \in \mathbb{N}^*$. Cependant, comme nous l'avons déjà mentionné, les opérateurs d'Ursell d'ordre $l \geq 3$ ne peuvent être connus exactement car on ne sait pas résoudre le problème à l corps correspondant. Il est donc utile, dans un premier temps, d'obtenir une expression approchée des opérateurs d'Ursell d'ordre $l \geq 3$ en fonction des opérateurs U_2 . C'est ce que nous faisons maintenant.

Il est commode à ce niveau d'exprimer les opérateurs d'Ursell U_2 en fonctions des opérateurs $\overline{U}_2$ définis par [112, 21] :

$$U_2(1, 2) = \sqrt{U_1(1)U_1(2)} \overline{U}_2(1, 2) \sqrt{U_1(1)U_1(2)} \quad (6.28)$$

(pour l'instant nous ne précisons pas la relation entre U_l et $\overline{U}_l$ lorsque $l \geq 3$, mais nous reviendrons sur ce point plus loin). Nous remarquons que $\overline{U}_2$ est défini ici de manière symétrique avec des racines carrées de U_1 de chaque côté de telle sorte que $\overline{U}_2$ soit Hermitien, ce qui n'est pas le cas dans [117]. L'introduction de l'opérateur $\overline{U}_2$ a deux avantages. Premièrement, la factorisation de l'énergie cinétique permet de se rapprocher de la situation de la mécanique classique où l'énergie cinétique se factorise toujours exactement. En d'autres termes, l'opérateur $\overline{U}_2(i, j)$ est l'équivalent quantique de la fonction de Mayer f_{ij} , bien que ces deux objets ne soient pas strictement analogues⁴. Deuxièmement, dans la limite de basse énergie, il est possible d'utiliser l'approximation MIME ("momentum independent matrix elements" en anglais) dans laquelle les éléments de matrice diagonaux de $\overline{U}_2$ sont indépendants des impulsions [117]. Pour distinguer graphiquement U_2 de $\overline{U}_2$, nous utilisons deux lignes verticales pour le premier opérateur, comme dans les Réfs. [106] et [111], mais une seule pour $\overline{U}_2$.

Partie réductible en arbre de $\overline{U}_l$ et U_l

Pour toute valeur de l , nous définissons les opérateurs réductibles en arbre ou opérateurs complètement réductibles $\overline{U}_l^R$ par analogie avec la partie réductible en

⁴En mécanique quantique les opérateurs ne commutent pas nécessairement, ce qui fait que l'énergie cinétique peut contribuer à $\overline{U}_2(i, j)$.

arbre des agrégats classiques b_l . Comme les liens classiques correspondent aux opérateurs $\overline{U}_2$ en mécanique quantique et que le nombre minimal de liens d'un agrégat de l particules est $l - 1$, nous exprimons l'opérateur complètement réductible $\overline{U}_l^R$ comme un produit de $l - 1$ opérateurs $\overline{U}_2$. Nous devons de plus tenir compte du fait que les opérateurs ne commutent pas nécessairement les uns avec les autres et symétriser en conséquence. Pour cela, nous définissons $\overline{U}_l^R$ par une somme double :

$$\overline{U}_l^R(1, 2, \dots, l) = \sum_{\{\overline{U}_2\}} \frac{1}{(l-1)!} \sum_{\{\text{ordre opérateurs}\}} \overline{U}_2(.,.) \overline{U}_2(.,.) \dots \overline{U}_2(.,.) \quad (6.29)$$

La première somme symbolise toute les façons différentes de choisir un ensemble de $l - 1$ opérateurs $\overline{U}_2$ de telle sorte que le produit de ces opérateurs correspondent à un agrégat connecté minimalement. En d'autres termes, dans les diagrammes en arbre classiques, nous remplaçons chaque f_{ij} par l'opérateur $\overline{U}_2(i, j)$ correspondant. La deuxième somme (avec le facteur $1/(l-1)!$) correspond à une moyenne du produit des opérateurs sur tous les ordres possibles des $l - 1$ opérateurs. Avec cette définition, $\overline{U}_l^R$ est Hermitien et symétrique vis à vis des particules numérotées 1, 2, ..., l . Par exemple :

$$\begin{aligned} \overline{U}_3^R(1, 2, 3) = & \frac{1}{2!} [\overline{U}_2(1, 2)\overline{U}_2(1, 3) + \overline{U}_2(1, 3)\overline{U}_2(1, 2)] \\ & + \frac{1}{2!} [\overline{U}_2(1, 2)\overline{U}_2(2, 3) + \overline{U}_2(2, 3)\overline{U}_2(1, 2)] \\ & + \frac{1}{2!} [\overline{U}_2(1, 3)\overline{U}_2(2, 3) + \overline{U}_2(2, 3)\overline{U}_2(1, 3)] \end{aligned} \quad (6.30)$$

La première ligne de l'équation précédente correspond au troisième diagramme classique du membre de droite de (5.16), la deuxième ligne au deuxième diagramme de (5.16) et la dernière ligne au premier diagramme de (5.16).

Nous souhaitons à présent définir un opérateur U_l^R que nous appelons partie réductible en arbre de U_l . L'idée la plus évidente est de mimer la définition (6.28) et de définir U_l^R en multipliant $\overline{U}_l^R$ des deux côtés par un produit d'opérateurs $\sqrt{U_1}$. Bien que ceci soit possible, il se trouve que cette définition est moins pratique qu'une autre où quelques unes des racines carrées de U_1 sont insérées à des positions différentes. Pour introduire cette définition, nous commençons par remarquer que la première somme de (6.29) peut être associée à un diagramme en arbre tel que ceux de la mécanique classique (voir la Fig. 6.1), où la particule 1 est placée à la racine, et est représentée par un disque vide, et le reste du diagramme est construit exactement de la même manière (les f_{ij} 's sont remplacés par des $\overline{U}_2(i, j)$'s). Le problème est maintenant de savoir comment "habiller" ce diagramme avec les $\sqrt{U_1}$'s de manière à construire un U_l^R correct. Nous allons faire cela progressivement, en commençant par la racine de l'arbre. Pour la particule 1, nous choisissons de placer un $\sqrt{U_1(1)}$ de chaque côté de $\overline{U}_l^R$, comme dans (6.28). Nous progressons ensuite le long des branches de l'arbre; nous considérons d'abord tous les $\overline{U}_2(1, j)$'s qui commencent à la racine, et associons à chacun un $\sqrt{U_1(j)}$ qui est inséré directement à la droite de cet opérateur $\overline{U}_2$; l'autre $\sqrt{U_1(j)}$ est simplement placé à la fin,

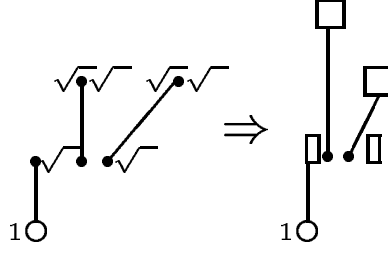


FIG. 6.2 – Dans ce diagramme, les lignes simples représentent les opérateurs $\overline{U}_2$ (par opposition aux lignes doubles qui représentent les opérateurs U_2 dans les diagrammes d’Ursell). La figure montre comment les $\sqrt{U_1}$ ’s (symbolisés par des racines carrées $\sqrt{}$ dans la partie gauche et par des rectangles dans la partie droite) sont insérés dans chaque produit de $\overline{U}_2$ ’s qui apparaît dans $\overline{U}_l^R$ pour construire un opérateur U_l^R .

après tous les $\overline{U}_2$ ’s. Nous appliquons ensuite la même procédure à la “deuxième génération” d’opérateurs $\overline{U}_2(j, k)$ ’s, et insérons à nouveau un $\sqrt{U_1(k)}$ directement à leur droite, un autre à la fin, etc. Nous continuons cette procédure jusqu’à ce que tout l’arbre soit habillé d’opérateurs U_1 ’s. La construction est représentée dans la Fig. 6.2. Lorsque nous appliquons cette procédure d’habillage à chaque terme du membre de droite de (6.29), nous aboutissons à un opérateur noté U_l^R . Par exemple, pour $l = 3$:

$$\begin{aligned} \widehat{U}_3^R(1, 2, 3) = & \frac{1}{2} \sqrt{U_1(1)} \left[\overline{U}_2(1, 2) \sqrt{U_1(2)} \overline{U}_2(1, 3) \sqrt{U_1(3)} + \right. \\ & + \overline{U}_2(1, 3) \sqrt{U_1(3)} \overline{U}_2(1, 2) \sqrt{U_1(2)} + \\ & + \overline{U}_2(1, 2) \sqrt{U_1(2)} \overline{U}_2(2, 3) \sqrt{U_1(3)} + \dots \left. \right] \times \\ & \times \sqrt{U_1(1) U_1(2) U_1(3)} \end{aligned} \quad (6.31)$$

Finalement, pour être certain que l’opérateur U_l^R soit Hermitien, nous le définissons simplement comme la partie Hermitique de $\widehat{U}_l^R$:

$$U_l^R(1, 2, \dots, l) = \frac{1}{2} \left[\widehat{U}_l^R(1, 2, \dots, l) + \left(\widehat{U}_l^R(1, 2, \dots, l) \right)^\dagger \right] \quad (6.32)$$

(nous montrons dans la suite que cette symétrisation n’a pas de conséquence pratique car les opérateurs sont sous des traces partielles : la distinction entre $\widehat{U}_l^R$ et U_l^R n’est alors pas essentielle.).

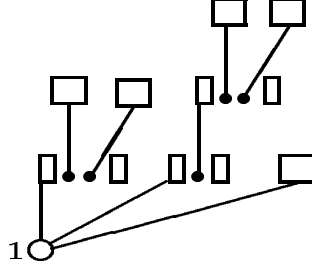


FIG. 6.3 – Cette figure représente un diagramme en arbre pour ρ_I . L'ordre des branches est déterminé par l'ordre des opérateurs sous la trace sur toutes les particules sauf la particule 1. La première branche verticale correspond au premier groupe d'opérateurs, la deuxième branche sur la droite au groupe suivant, etc. De plus chaque opérateur $\overline{U}_2$ est accompagné de deux opérateurs $\sqrt{U_1}$; pour simplifier le diagramme, ils sont représentés par des demi-carrés (rectangles). Un carré entier représente un opérateur U_1 .

Trace partielle

Dans l'objectif de calculer ρ_I , nous considérons à présent la trace partielle par rapport aux particules 2, 3, ..., l de l'opérateur U_l^R :

$$Tr_{2,3,\dots,l} \{U_l^R(1, 2, 3, \dots, l)\} \quad (6.33)$$

C'est encore un opérateur dans l'espace des états de la particule 1. Comme U_l^R est obtenu à partir de (6.29) en ajoutant des $\sqrt{U_1}$'s à certaines places appropriées dans chaque terme de la somme, la trace contenue dans (6.33) peut aussi s'exprimer comme la somme de traces de produits d'opérateurs. A chacun de ces termes, nous allons associer un nouveau type de diagrammes en arbre qui ressemble à celui de la Fig. 6.2, mais où l'ordre des branches reflète l'ordre des opérateurs sous la trace (plutôt que d'être lié à la numérotation des particules).

Ordre normal L'objectif de ce paragraphe est de placer les opérateurs dans un ordre "normal" qui peut être décrit par un diagramme en arbre correspondant à une contribution bien définie à la trace partielle (6.27) qui donne ρ_I . Comme précédemment, le disque blanc à la racine correspond à la particule 1, mais maintenant la branche supérieure correspond à la première séquence d'opérateurs qui apparaît dans la trace, la deuxième branche à la deuxième séquence, etc. Ce nouveau diagramme en arbre (voir Fig. 6.3) n'est en fait pas très différent du diagramme en arbre initial : la seule différence est l'ordre dans lequel les branches sont placées.

Nous commençons par considérer un certain terme du membre de droite de (6.29) et nous intéressons à sa trace partielle. Pour l'instant, nous laissons de côté les $\sqrt{U_1}$'s, et définissons la notion d'ordre "normal" pour la trace partielle

de n'importe quel terme apparaissant dans la somme définissant $\overline{U}_l(1, 2, \dots, l)$. Pour obtenir cet ordre normal, la première étape consiste à localiser le premier opérateur du produit qui contient la particule 1, ainsi qu'une autre particule i , $\overline{U}_2(1, i)$, et à le déplacer vers le début de la séquence d'opérateurs $\overline{U}_2$ (i.e. le plus à gauche du produit) : tous les opérateurs qui apparaissent avant sont déplacés vers la fin de la séquence (i.e. à droite), dans le même ordre, en utilisant la propriété d'invariance par permutation circulaire de la trace. La deuxième étape consiste à localiser, parmi tous les opérateurs situés après le premier, celui qui est le premier $\overline{U}_2(i, j)$ à contenir i , et à le déplacer en deuxième position, directement à droite de $\overline{U}_2(1, i)$. Ceci est possible, car si les opérateurs intermédiaires ne contiennent pas ⁵ la particule 1, ils peuvent être déplacés à gauche de $\overline{U}_2(1, i)$ et ensuite à la fin de la séquence ; si ils contiennent la particule 1, ils ne peuvent contenir ⁶ la particule j et peuvent donc être placés immédiatement après $\overline{U}_2(i, j)$. La séquence commence maintenant avec le produit $\overline{U}_2(1, i)\overline{U}_2(i, j)$. La troisième étape est similaire à la deuxième : on localise à droite de $\overline{U}_2(i, j)$ le premier opérateur qui contient la particule j , $\overline{U}_2(j, k)$, et on le déplace directement au troisième rang de la séquence, par la même procédure : si les opérateurs intermédiaires ne contiennent ⁷ ni la particule 1 ni la particule i ni la particule j , ils sont déplacés vers l'avant puis à la fin ; si ils contiennent l'une de ces particules, ils ne contiennent pas ⁸ la particule k et ils sont déplacés immédiatement après $\overline{U}_2(j, k)$. La série débute maintenant par le produit $\overline{U}_2(1, i)\overline{U}_2(i, j)\overline{U}_2(j, k)$. La même procédure se répète par itération jusqu'à ce qu'on atteigne le bout d'une branche, avec une particule qui n'apparaît dans aucun autre $\overline{U}_2$.

La suite consiste à construire une nouvelle branche et donc à sélectionner un point de ramification. Pour cela, on revient en arrière le long de la première branche, on localise la première particule numérotée m , dans l'opérateur $\overline{U}_2(m, p)$, qui apparaît (au moins) une deuxième fois dans la liste des opérateurs restant, dans $\overline{U}_2(m, n)$. Ce dernier opérateur est alors déplacé directement à droite de $\overline{U}_2(m, p)$ et crée le point de départ d'une nouvelle branche. La nouvelle branche est alors construite comme la première. Lorsque cette branche est finie, deux cas se produisent : soit la particule m apparaît une troisième fois (ou plus) de telle sorte que trois branches (ou plus) partent du même point ; soit la particule m n'apparaît plus et on continue alors à revenir en arrière sur la branche principale pour trouver une autre particule qui apparaît encore dans un des opérateurs $\overline{U}_2$ non ordonnés. Tous les opérateurs sont maintenant à la bonne place et le processus s'arrête.

A présent, pour obtenir la contribution à la trace, nous devons ajouter les

⁵Ils ne peuvent contenir la particule i par hypothèse.

⁶Ils ne peuvent contenir à la fois 1 et j , sinon ces deux particules seraient liées deux fois, ce qui est en contradiction avec la structure en arbre, voir Fig. 6.2.

⁷Ils ne peuvent contenir la particule j par hypothèse.

⁸Les opérateurs intermédiaires ne peuvent contenir à la fois k et une des particules 1, i ou j : par exemple, si ils contenaient k et i , ces deux particules seraient liées deux fois (directement et par la particule j), ce qui est contradiction avec la structure en arbre.

$\sqrt{U_1}$'s aux places appropriées. Ceci ne change pas beaucoup le raisonnement fait pour ordonner les opérateurs $\overline{U}_2$: les $\sqrt{U_1}$'s à la fin du produit ne bougent pas au cours de l'opération, alors que ceux qui suivent directement un $\overline{U}_2$ se déplacent avec lui (ceci est possible car ils ne changent pas les règles de commutation). En conséquence, tous les opérateurs peuvent être mis dans l'ordre normal exactement de la même façon que pour les $\overline{U}_2$'s seuls.

Evidemment, la numérotation des particules, à part celle de la particule 1, n'est pas importante pour la valeur de la trace ; ce qui est important, c'est la géométrie de l'arbre puisqu'elle détermine la valeur de l'opérateur restant après que la trace partielle soit prise ⁹. C'est pourquoi un diagramme tel que celui de la Fig. 6.3 correspond à une contribution bien définie à la trace. Une autre remarque est que la contribution de $\widehat{U}_l^R$ à la trace aboutie déjà à un opérateur Hermitien dans l'espace des états de la particule 1 : par permutation circulaire sous la trace, il est facile de montrer que le renversement de l'ordre des opérateurs aboutit à un arbre dont l'ordre des branches est renversé, en d'autres termes à un arbre qui existe déjà dans $\widehat{U}_l^R$ et assure l'Hermiticité de la trace partielle. Ceci signifie que la symétrisation Hermitique de (6.32) n'est en réalité pas nécessaire. Dorénavant nous ne considérons plus que la trace de $\widehat{U}_l^R$.

Poids des diagrammes en arbre A partir des résultats obtenus ci-dessus, nous pouvons écrire la trace partielle de $\widehat{U}_l^R$ comme une somme sur tous les diagrammes tels que ceux de la Fig. 6.3. Nous voulons maintenant déterminer leur poids, i.e. le nombre de termes de la double somme (6.29) qui correspondent à chaque diagramme. Le raisonnement est analogue à celui de §6.1.2, sauf que nous manipulons des opérateurs à la place de la numérotation des particules. Supposons que nous attribuions des numéros aléatoires aux noeuds de ce diagramme : comme la particule 1 est toujours à la racine, ceci peut être fait de $(l-1)!$ façons différentes. A chacune de ces numérotations correspond une séquence d'opérateurs $\overline{U}_2$ et donc un terme donné de la première somme de (6.29). Combien de termes de la deuxième somme correspondent à ce diagramme ? Pour répondre à cette question, il faut considérer les facteurs de branchement ou de ramification r_1, r_2 , etc. définis dans §6.1.2. Dans la liste des $\overline{U}_2$'s, les seuls opérateurs qui ne commutent pas sont ceux qui contiennent une particule commune. En commençant avec n'importe quel ordre d'opérateurs et après les avoir ordonnés suivant la procédure d'ordre normal, il est facile de voir qu'il y a une probabilité $1/(r_1)!$ que la première ramification prenne sa place normale dans la séquence des opérateurs, une probabilité $1/(r_1)!(r_2)!$ que l'ordre normal soit obtenu après deux ramifications, etc. Finalement, parmi tous les opérateurs contenus dans la deuxième somme de (6.29), le nombre de termes

⁹Cependant des arbres différents ne correspondent pas nécessairement à des résultats différents.

qui correspondent à chaque diagramme en arbre est :

$$\frac{(l-1)!}{\Pi_i(r_i)!} \quad (6.34)$$

Si nous tenons compte du facteur $(l-1)!$ mentionné plus haut, correspondant à la première somme, et du facteur $1/(l-1)!$ qui est explicité dans (6.29), nous obtenons le poids suivant pour les diagrammes en arbre :

$$(l-1)! \frac{1}{(l-1)!} \frac{(l-1)!}{\Pi_i(r_i)!} = \frac{(l-1)!}{\Pi_i(r_i)!} \quad (6.35)$$

Pour la trace partielle de U_l^R , le résultat est

$$Tr_{2,3,\dots,l} \{U_l^R(1, 2, 3, \dots, l)\} = \sum_{\{\text{diagrammes } \rho_I\}} \frac{(l-1)!}{\Pi_i(r_i)!} T_{diag.}(1) \quad (6.36)$$

où $T_{diag.}(1)$ est l'opérateur (agissant dans l'espace des états de la particule 1) qui est obtenu par la trace partielle correspondant au diagramme avec les facteurs de branchement r_1, r_2 , etc.

Déplacement en énergie pour ρ_I

L'étape suivante consiste à obtenir l'opérateur densité à un corps ρ_I . Lorsqu'on ne retient que la partie réductible en arbre des opérateurs d'Ursell, l'équation (6.27) devient :

$$\begin{aligned} \rho_I(1) = & zU_1(1) + z^2 Tr_2 \{U_2^R(1, 2)\} \\ & + \frac{z^3}{2!} Tr_{2,3} \{U_3^R(1, 2, 3)\} + \dots \\ & + \frac{z^{l-1}}{(l-1)!} Tr_{2,\dots,l} \{U_l^R(1, \dots, l)\} + \dots \end{aligned} \quad (6.37)$$

En remplaçant les opérateurs d'Ursell réduits par leur expression comme sommes de diagrammes en arbre et en tenant compte des facteurs de comptage (6.35), on voit que ρ_I s'écrit :

$$\begin{aligned} \rho_I(1) = & \sqrt{zU_1(1)} \left\{ 1 + \frac{z}{1!} \times \text{diagramme 1} + \right. \\ & + \frac{z^2}{2!} \left(\frac{2!}{2!} \times \text{diagramme 2} + \frac{2!}{1!} \times \text{diagramme 3} \right) \\ & + \dots + \frac{z^{l-1}}{(l-1)!} \times \frac{(l-1)!}{\Pi_i(r_i)!} \times \text{diagramme } l \\ & \left. + \dots \right\} \sqrt{zU_1(1)} \end{aligned} \quad (6.38)$$

Il est maintenant possible de regrouper les diagrammes en fonction de leur “premier facteur de branchement” $1/(r_1)!$ et d’écrire :

$$\rho_I(1) = \sqrt{zU_1(1)} \left\{ 1 + \begin{array}{c} \square \\ | \\ \circ \end{array} + z^2 \begin{array}{c} \square \square \\ | \quad | \\ \circ \end{array} + \frac{1}{2!} z^3 \begin{array}{c} \square \square \square \\ | \quad | \quad | \\ \circ \end{array} + \dots \right. \\ \left. + \frac{1}{1!} \left(z \begin{array}{c} \square \\ | \quad \diagup \\ \circ \end{array} + z^2 \begin{array}{c} \square \square \\ | \quad \diagup \quad \diagup \\ \circ \end{array} + \dots \right) + \dots \right\} \sqrt{zU_1(1)} \quad (6.39)$$

Comme dans le cas classique, nous remarquons une propriété d’auto-similarité du développement, ce qui permet de faire apparaître l’opérateur densité à un corps dans le membre de droite de l’équation :

$$\rho_I(1) = \sqrt{zU_1(1)} \left\{ 1 + \begin{array}{c} \overline{\square} \\ | \\ \circ \end{array} + \frac{1}{2!} \times \begin{array}{c} \overline{\square} \\ | \quad \overline{\square} \\ \circ \end{array} + \dots + \frac{1}{r_1!} \times \begin{array}{c} \overline{\square} \overline{\square} \\ | \quad \overline{\square} \quad \overline{\square} \\ \circ \end{array} + \dots \right\} \sqrt{zU_1(1)} \quad (6.40)$$

Nous reconnaissons le développement de l’opérateur exponentiel et obtenons finalement :

$$\rho_I(1) = \sqrt{zU_1(1)} \exp (Tr_2 \{ \overline{U}_2(1, 2) \rho_I(2) \}) \sqrt{zU_1(1)} \quad (6.41)$$

En introduisant la définition de l’opérateur déplacement en énergie $\Delta(1)$, on peut réécrire le résultat précédent :

$$-\beta\Delta(1) = Tr_2 \{ \overline{U}_2(1, 2) \rho_I(2) \} \quad (6.42)$$

où

$$\rho_I(1) = \sqrt{U_1(1)} z e^{-\beta\Delta(1)} \sqrt{U_1(1)} \quad (6.43)$$

La définition précédente rappelle celle de la mécanique classique (6.1) et montre que l’opérateur déplacement de l’énergie $\Delta(1)$ est proche d’une “self-énergie”. Nous trouvons donc que l’opérateur déplacement en énergie dépend linéairement de l’opérateur densité à un corps (proportionnel à la densité) ce qui correspond exactement à l’approximation du champ moyen et est équivalent à l’agrégat irréductible β_1 en mécanique classique.

Discussion physique

Le calcul précédent illustre le mécanisme physique à l’origine du champ moyen en mécanique statistique à l’équilibre : lorsque la particule 1 interagit avec la particule i , il est possible qu’elle interagisse également avec la particule j , et ainsi de

suite. De plus, la particule test, ou n'importe quelle autre particule, peut très bien interagir avec plusieurs autres particules ; ceci introduit des ramifications dans le diagramme en arbre, soit à la racine soit ailleurs. Par contre il n'est pas possible de créer des "boucles" : n'importe quelle particule peut interagir avec une ou plusieurs de ses voisines, et ces interactions peuvent se propager plus loin par l'intermédiaire d'autres particules, mais elles ne doivent pas revenir à la première particule. C'est une hypothèse similaire à celle du chaos moléculaire dans l'équation cinétique de Boltzmann où les recollisions sont négligées.

Nous remarquons que l'expression (6.42) fait intervenir l'opérateur $\overline{U}_2(1, 2)$, mais pas le potentiel V_{12} , comme c'est généralement le cas dans l'approximation du champ moyen. En d'autres termes, le champ moyen fait intervenir des éléments de matrice d'une exponentielle contenant le potentiel d'interaction, ou plus précisément la différence de deux exponentielles correspondant à une modification de l'équilibre local de Boltzmann, plutôt que les éléments de matrice de V_{12} lui-même. Bien sûr, si le potentiel peut être traité au premier ordre de la théorie des perturbations, ceci n'introduit pas de différence. Cependant, les potentiels interatomiques usuels, tels que celui de la Fig. 5.1, ne peuvent pas être traités au premier ordre en théorie des perturbations et dans ce cas la différence est grande. Un exemple bien connu en physique des gaz atomiques ultrafroids est celui des atomes alcalins qui ont un puits de potentiel attractif très profond capable de contenir un grand nombre d'états liés. Cependant le déphasage en onde s , i.e. à basse énergie, peut correspondre à une longueur de diffusion a soit positive (répulsion effective) soit négative (attraction effective) et cela en fonction de détails très fins de la forme exacte du potentiel ¹⁰. Un raisonnement naïf en terme du potentiel lui-même conduit à l'idée que dans un gaz dilué d'atomes alcalins, le champ moyen est toujours attractif. On sait expérimentalement et théoriquement que ce n'est pas le cas : le champ moyen est attractif quand $a < 0$ et répulsif quand $a > 0$. La manière habituelle d'expliquer ce résultat est de remplacer le véritable potentiel V_{12} par un pseudo-potentiel [44] directement proportionnel à la longueur de diffusion a . On peut traiter le pseudo-potentiel à l'approximation de Born et démontrer qu'il reproduit les véritables propriétés de collisions binaires à basse énergie. Ici, nous voyons clairement que les éléments de matrice qui apparaissent naturellement sont ceux de $\overline{U}_2(1, 2)$. Ces derniers peuvent être exprimés en fonction des déphasages du problème à deux corps [117]. On montre alors que ces derniers sont proportionnels à la longueur de diffusion à basse énergie ¹¹. Il

¹⁰En fait, même un potentiel purement attractif peut avoir une longueur de diffusion négative. Le signe de la longueur de diffusion dépend de la position du dernier état lié par rapport au continuum des états de diffusion.

¹¹Plus précisément, ceci est vrai pour la partie dominante des éléments de matrice qui dépendent de la valeur de la fonction d'onde de collision en-dehors du potentiel d'interaction (i.e. de l'état asymptotique de collision). Une autre contribution vient de la fonction d'onde à l'intérieur de la portée du potentiel. Cette dernière est négligeable si la portée du potentiel est petite.

existe également d'autres moyens de prouver le même résultat ; par exemple, dans le formalisme des fonctions de Green, on peut resommer une classe de diagrammes (diagrammes en échelle) pour reconstruire la matrice T de collision à partir du vrai potentiel V_{12} et obtenir la longueur de collision comme limite de basse énergie des éléments de matrice T (voir Réf. [34], par exemple).

Une autre remarque est que l'équation (6.41) montre que ρ_I s'écrit comme un produit d'exponentielles et pas comme l'exponentielle d'une somme. Pour un système invariant par translation, cette distinction n'est pas importante puisque tous les opérateurs à un corps sont diagonaux dans la base des états d'impulsion et commutent donc. Dans les autres cas, il faut tenir compte de la non-commutativité des opérateurs. Par exemple, l'opérateur Hermitien Δ ne peut pas être exactement interprété comme une correction à l'Hamiltonien à un corps.

Finalement, nous remarquons que le raisonnement précédent peut se généraliser. Ici, nous avons exprimé les parties réductibles des opérateurs d'Ursell $l \geq 3$ en fonction de l'opérateur irréductible $\overline{U}_2$. Nous n'avons pas tenu compte de la partie irréductible $\overline{U}_3^{Irr.}$ de $\overline{U}_3$. Il est cependant possible d'aller plus loin et d'utiliser $\overline{U}_3^{Irr.}$ comme brique fondamentale d'une autre décomposition pour les $\overline{U}_l$'s avec $l \geq 4$. C'est ce que nous exposons brièvement dans le paragraphe ci-dessous.

Irréductibilité pour $l \geq 3$

La partie réductible $\overline{U}_l^R(1, 2, \dots, l)$ de l'opérateur d'Ursell à l particules $\overline{U}_l(1, 2, \dots, l)$ est définie à partir d'arbres constitués de chaînes d'opérateurs $\overline{U}_2$. Par exemple, l'opérateur d'Ursell à 3 particules s'écrit comme la somme d'une partie réductible et d'une partie irréductible :

$$\overline{U}_3(1, 2, 3) = \overline{U}_3^R(1, 2, 3) + \overline{U}_3^{Irr.}(1, 2, 3) \quad (6.44)$$

Nous allons maintenant montrer comment la notion de réductibilité peut être généralisée : la partie irréductible $\overline{U}_3^{Irr.}$ peut servir, comme $\overline{U}_2$, de brique élémentaire pour définir la partie "réductible à $\overline{U}_3$ " des opérateurs $\overline{U}_l$ avec $l \geq 4$ à partir de produits de $\overline{U}_2$'s et de $\overline{U}_3^{Irr.}$'s.

L'idée de base est de construire des arbres non seulement avec des lignes représentant les $\overline{U}_2$'s, mais aussi avec des triangles représentant les $\overline{U}_3^{Irr.}$'s. La Fig. 6.4 montre l'exemple d'un tel arbre : à chaque ramification, on peut maintenant ajouter soit des lignes, soit le coin d'un triangle ; dans ce deuxième cas, les deux autres coins peuvent alors également être connectés pour continuer la branche avec n'importe quel produit de $\overline{U}_2$'s et $\overline{U}_3^{Irr.}$'s. Une différence résulte du fait que chaque $\overline{U}_3^{Irr.}$ ajouté introduit deux nouveaux points de branchement (à la place d'un seul pour $\overline{U}_2$). On peut alors se demander lequel est représenté en premier dans l'ordre des aiguilles d'une montre ; il est facile de voir que ceci implique l'existence d'un facteur de comptage $1/2$ pour chaque $\overline{U}_3^{Irr.}$ contenu dans le diagramme. Ceci mis

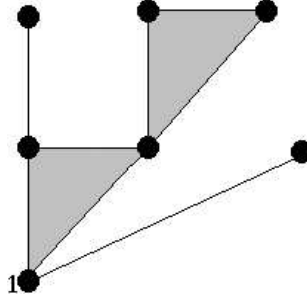


FIG. 6.4 – Un exemple de diagramme incluant la partie irréductible $\overline{U}_3^{Irr.}$ de l'opérateur d'Ursell à 3 particules U_3 , symbolisée par un triangle plein. Ce type de diagramme contribue à un opérateur déplacement en énergie quadratique en ρ_I .

à part, peu de choses changent si tous les facteurs de branchement qui résultent de $\overline{U}_3^{Irr.}$'s sont inclus dans le facteur de comptage; en d'autres termes, dans la formule (6.25), un facteur $(1/2)^{n_3}$ est ajouté (où n_3 est le nombre de $\overline{U}_3^{Irr.}$'s), et les facteurs de branchement r_i incluent maintenant l'effet des $\overline{U}_3^{Irr.}$'s. En conséquence, la propriété d'auto-similarité est à nouveau présente et le raisonnement fait dans le cas de $\overline{U}_2$ reste essentiellement le même. On trouve alors que l'opérateur $\Delta(1)$:

$$\begin{aligned} -\beta\Delta(1) &= Tr_2 \{ \overline{U}_2(1,2)\rho_I(2) \} + \\ &+ Tr_{2,3} \left\{ \frac{1}{2!} \overline{U}_3^{Irr.}(1,2,3)\rho_I(2)\rho_I(3) \right\} \end{aligned} \quad (6.45)$$

En d'autres termes, le déplacement en énergie n'est plus proportionnel à l'opérateur densité à un corps, mais contient un terme quadratique en ρ_I . Ce terme est l'équivalent du terme proportionnel à l'agrégat irréductible β_2 en mécanique classique. De manière similaire, on peut s'attendre à ce que la partie irréductible $\overline{U}_4^{Irr.}$ de $\overline{U}_4$ donne naissance à une contribution au déplacement en énergie qui est cubique en ρ_I , et ainsi de suite. Nous n'avons pas encore fait ces calculs.

Equation d'état

Nous voulons maintenant faire le lien avec la mécanique statistique classique et notamment avec l'obtention de l'équation d'état d'un système dense. En particulier, nous souhaitons montrer la similarité entre l'équation donnant l'opérateur déplacement en énergie (6.45) et l'équation (6.2) qui conduit à l'élimination de la fugacité z entre (5.17) et (5.18) pour aboutir à l'équation d'état. Pour éviter des complications inutiles, nous supposons qu'il n'y a pas de potentiel extérieur et que le système est donc invariant par translation. Nous appelons ρ_k les éléments diagonaux de ρ_I en représentation d'impulsion :

$$\rho_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k} | \rho_I | \mathbf{k} \rangle \quad (6.46)$$

et $u_1(\mathbf{k})$ ceux de U_1 :

$$u_1(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} | U_1 | \mathbf{k} \rangle = e^{-\beta e_k}$$

où $e_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ est l'énergie cinétique d'une particule de vecteur d'onde $\mathbf{k}$. Les éléments de matrice diagonaux de U_2 en représentation d'impulsion sont notés :

$$u_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U_2 | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle$$

(pour le moment nous ne prenons pas l'approximation MIME), ceux de U_3 sont notés $u_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$, etc. L'équation (5.36) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \rho_{\mathbf{k}} = & z u_1(\mathbf{k}) \left[1 + z \sum_{\mathbf{k}'} u_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') u_1(\mathbf{k}') + \right. \\ & \left. + \frac{z^2}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} u_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') u_1(\mathbf{k}') u_1(\mathbf{k}'') + \dots \right] \end{aligned} \quad (6.47)$$

En introduisant le déplacement en énergie $\Delta(\mathbf{k})$ par la relation

$$\rho_{\mathbf{k}} = z u_1(\mathbf{k}) \times e^{-\beta \Delta(\mathbf{k})} \quad (6.48)$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned} e^{-\beta \Delta(\mathbf{k})} = & 1 + z \sum_{\mathbf{k}'} u_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') u_1(\mathbf{k}') + \\ & + \frac{z^2}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} u_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') u_1(\mathbf{k}') u_1(\mathbf{k}'') + \dots \end{aligned} \quad (6.49)$$

Dans cette équation, le déplacement en énergie $\Delta(\mathbf{k})$ est exprimé comme une série en puissances des populations $z u_1(\mathbf{k})$ du gaz parfait ; mais si nous écrivons

$$\begin{aligned} e^{-\beta \Delta(\mathbf{k})} = & 1 + \sum_{\mathbf{k}'} u_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{\beta \Delta(\mathbf{k}')} \rho_{\mathbf{k}'} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} u_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'') e^{\beta [\Delta(\mathbf{k}') + \Delta(\mathbf{k}'')]} \rho_{\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}''} \\ & + \dots \end{aligned} \quad (6.50)$$

nous obtenons une autre expression où seules les véritables populations $\rho_{\mathbf{k}'}$ apparaissent et où la variable z a disparue. Finalement, il suffit de prendre le logarithme du membre de droite de cette série pour obtenir l'expression du déplacement en énergie $\Delta(\mathbf{k})$ comme fonction des populations et des autres déplacements en énergie $\Delta(\mathbf{k}')$.

Dans l'approximation MIME, les constantes d'interactions u_2 , u_3 , etc. se factorisent à l'extérieur des sommes, le déplacement en énergie devient une constante Δ indépendante de l'impulsion $\mathbf{k}$, et nous obtenons simplement :

$$e^{-\beta \Delta} = 1 + u_2 e^{\beta \Delta} N + \frac{u_3}{2} e^{2\beta \Delta} N^2 + \dots \quad (6.51)$$

où $N \equiv \langle N \rangle$ est le nombre moyen total de particules, i.e. la trace de ρ_I . Cette équation fournit une relation implicite entre le déplacement en énergie Δ et la

densité $\rho = N/\mathcal{V}$, car u_2 est inversement proportionnel au volume, u_3 est inversement proportionnel au carré du volume, etc. A partir de là, on peut développer le déplacement en énergie en puissances de la densité :

$$-\beta\Delta = u'_2\mathcal{V} \times \rho + u'_3\mathcal{V}^2 \times \rho^2 + u'_4\mathcal{V}^3 \times \rho^3 + \dots \quad (6.52)$$

où les nouveaux coefficients $u'_2, u'_3, u'_4, \dots$ peuvent être calculés terme à terme en insérant cette relation dans (6.51) : par exemple : $u'_2 = u_2$ et $u'_3 = (u_3 - 3u_2^2)/2$. Encore une fois, le premier terme du membre de droite de (6.52) correspond au champ moyen et les suivants à des corrections en densité. Cette équation est maintenant dans une forme identique à celle de l'équation classique (6.2). L'obtention de l'équation d'état se fait alors exactement comme dans le cas classique, voir les équations (6.2) à (6.8).

6.2.2 Statistique de Bose/Fermi

Le formalisme pour les particules identiques (bosons ou fermions) diffère de celui des particules de Boltzmann par la présence de cycles d'échange. Ces derniers introduisent des lignes horizontales dans les diagrammes d'Ursell [106, 111, 112] qui se combinent avec les opérateurs d'Ursell. Le résultat est qu'il faut tenir compte de beaucoup plus de diagrammes pour traiter la statistique quantique. Malgré cette grande différence, nous allons voir qu'un mécanisme très semblable à celui du cas des particules de Boltzmann se produit avec les bosons ou les fermions : des corrections à l'énergie à une particule apparaissent naturellement.

Equations générales

Nous avons déjà mentionné dans le chapitre consacré au gaz dilué que pour des particules identiques, l'équation (5.36) est remplacée par :

$$\begin{aligned} \rho_I = f_1 &+ \begin{array}{c} \boxed{1+\eta f_1} \\ | \\ \boxed{1+\eta f_1} \end{array} \\ &+ \begin{array}{c} \boxed{1+\eta f_1} \quad \boxed{1+\eta f_1} \\ | \quad | \\ \boxed{1+\eta f_1} \end{array} \\ &+ \begin{array}{c} \boxed{1+\eta f_1} \quad \boxed{1+\eta f_1} \quad \boxed{1+\eta f_1} \\ | \quad | \quad | \\ \boxed{1+\eta f_1} \end{array} + \dots \end{aligned} \quad (6.53)$$

où f_1 est l'opérateur densité à un corps pour le gaz parfait :

$$f_1(1) = \frac{zU_1(1)}{1 - \eta zU_1(1)} \quad (6.54)$$

où $\eta = +1$ pour des bosons et $\eta = -1$ pour des fermions. Dans l'équation (6.53), les opérateurs $[1 + \eta f_1]$ résultent de la sommation sur toutes les longueurs de cycle

l possibles (allant de $l = 0$ à l'infini) du produit $[\eta z U_1(1)]^l$ ¹². En général, dans tous ces diagrammes, la ligne horizontale la plus basse correspond à la multiplication d'opérateurs dans l'espace des états de la particule 1, alors que toutes les autres lignes horizontales correspondent à d'autres particules sur lesquelles on trace.

Dans la Réf. [112], des séries infinies donnant ρ_I dans l'équation (6.53) sont resommées de manière auto-cohérente :

$$\begin{aligned} \rho_I = f_1 &+ \text{diagramme 1} \\ &+ \text{diagramme 2} \\ &+ \text{diagramme 3} + \dots \end{aligned} \quad (6.55)$$

Par exemple, le diagramme de la troisième ligne de (6.53), ainsi que beaucoup d'autres diagrammes similaires, sont maintenant inclus dans le premier terme après f_1 dans (6.55), qui symbolise l'expression :

$$2z^2 (1 + \eta f_1(1)) \text{Tr}_2 \{U_2(1, 2) [1 + \eta \rho_I(2)]\} (1 + \eta \rho_I(1)) \quad (6.56)$$

Dans (6.55), le deuxième terme après f_1 est le terme d'échange du terme (6.56). Il peut en effet être écrit :

$$\begin{aligned} 2z^2 (1 + \eta f_1(1)) \text{Tr}_2 \{U_2(1, 2) \eta P_{ex.}(1, 2) [1 + \eta \rho_I(2)]\} \times \\ \times (1 + \eta \rho_I(1)) \end{aligned} \quad (6.57)$$

où $P_{ex.}$ est l'opérateur d'échange des particules 1 et 2. Ces deux termes se regroupent naturellement si nous introduisons les définitions symétrisées ($S : \eta = 1$) ou antisymétrisées ($A : \eta = -1$) de l'opérateur U_2 :

$$U_2^{S,A}(1, 2) = \frac{1 + \eta P_{ex.}(1, 2)}{2} U_2(1, 2) \quad (6.58)$$

Pour un gaz *dilué*, ils ont été identifiés dans la Réf. [112] comme des corrections de champ moyen qui ne modifient pas la température de condensation de Bose-Einstein à l'approximation MIME. L'expression explicite du troisième terme est :

$$\begin{aligned} 2z^2 (1 + \eta f_1(1)) \text{Tr}_2 \{U_2(1, 2) (1 + \eta \rho_I(1)) (1 + \eta \rho_I(2)) \times \\ \times U_2(1, 2) (1 + \eta \rho_I(2)) (1 + \eta \rho_I(1))\} \end{aligned} \quad (6.59)$$

et comme le terme précédent, il se regroupe naturellement avec son diagramme d'échange (qui n'est pas représenté).

¹²l'origine du facteur η est que pour des fermions, chaque cycle d'échange de longueur l introduit un facteur $(-1)^l$.

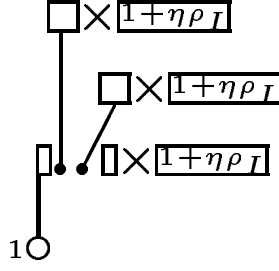


FIG. 6.5 – Lorsqu'on inclut la statistique quantique, ce diagramme remplace celui de la partie droite de la Fig. 6.2. On note la présence de facteurs statistiques $[1 + \eta \rho_I]$.

Exponentiation

Notre objectif est maintenant d'introduire des exponentielles pour faire apparaître le déplacement en énergie $\Delta(1)$. Pour le gaz parfait, la distribution à un corps est donnée par (6.54) de telle sorte que :

$$1 + \eta (f_1)^{-1} = \eta [z U_1]^{-1} = \eta \exp [\beta (H_1(1) - \mu)] \quad (6.60)$$

De même :

$$\eta [1 + \eta (f_1)^{-1}]^{-1} = \frac{f_1}{1 + \eta f_1} = z U_1 \quad (6.61)$$

où la même exponentielle apparaît, avec un exposant négatif cette fois. Pour calculer le déplacement en énergie, il est alors naturel d'introduire des quantités telles que $1 + \eta(\rho_1)^{-1}$ ou $\rho_1/(1 + \eta \rho_1)$.

Pour faire cela, nous remarquons que la ligne horizontale la plus basse de chaque diagramme contenu dans (6.53) débute et termine avec les mêmes opérateurs, en conséquence l'équation (6.55) peut se réécrire :

$$\rho_I(1) = f_1(1) + [1 + \eta f_1(1)] K(1) [1 + \eta \rho_I(1)] \quad (6.62)$$

où l'opérateur K est une somme infinie de traces partielles, contenant différents nombres de traces de U_2 's ainsi que des $[1 + \eta \rho_I]$'s dans les lignes horizontales intermédiaires :

$$K = \begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ + \text{Diagram 2} \\ + \text{Diagram 3} \\ + \text{Diagram 4} \\ + \dots \end{array} \quad (6.63)$$

The diagrams in the sum for K are as follows:
 - Diagram 1: A single horizontal line with a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it.
 - Diagram 2: Two horizontal lines connected by a vertical line. The bottom line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it. The top line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it.
 - Diagram 3: Three horizontal lines connected by two vertical lines. The bottom line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it. The middle line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it. The top line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it.
 - Diagram 4: Four horizontal lines connected by three vertical lines. The bottom line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it. The second line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it. The third line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it. The top line has a box labeled $1 + \eta \rho_I$ above it.

En d'autres termes, les diagrammes correspondant à K sont obtenus à partir de ceux de ρ_I simplement en enlevant les deux parties externes de la ligne horizontale la plus basse : on parle d'amputation d'un diagramme. L'opérateur K est clairement Hermitien comme on peut le voir en utilisant la permutation circulaire sous la trace.

A présent, si nous multiplions les deux membres de l'égalité (6.62) par $(f_1)^{-1}$ à gauche et par $(\rho_I)^{-1}$ à droite, nous obtenons :

$$(f_1)^{-1} = (\rho_I)^{-1} + (1 + \eta (f_1)^{-1}) K (1 + \eta (\rho_I)^{-1}) \quad (6.64)$$

Si nous multiplions les deux membres par η , ajoutons 1 et tenons compte de (6.61), nous arrivons à :

$$1 + \eta (f_1)^{-1} = [1 + (zU_1)^{-1} K] [1 + \eta (\rho_I)^{-1}] \quad (6.65)$$

ou encore :

$$\frac{\rho_I}{1 + \eta \rho_I} = zU_1 + K \quad (6.66)$$

En l'absence d'interactions, K est nul et nous retrouvons l'équation (6.61); K apparaît donc comme une correction à zU_1 introduite par les interactions.

De façon similaire à (6.60), nous définissons l'opérateur déplacement en énergie $\Delta(1)$ par ¹³ :

$$1 + (\eta \rho_I)^{-1} = \eta [zU_1(1)]^{-1/2} e^{\beta \Delta(1)} [zU_1(1)]^{-1/2} \quad (6.67)$$

qui conduit à :

$$\exp \{-\beta \Delta(1)\} = \left[1 + \frac{1}{\sqrt{zU_1(1)}} K(1) \frac{1}{\sqrt{zU_1(1)}} \right] \quad (6.68)$$

La série qui définit l'opérateur $K(1)$ contient donc toute l'information sur les déplacements en énergie pour l'opérateur densité à un corps; l'équation (6.68) est l'équivalent opératoriel de la relation (6.49) lorsqu'on ajoute la statistique quantique.

Calcul des déplacements en énergie

Notre objectif est maintenant de calculer le déplacement en énergie en fonction de la densité, ou de l'opérateur densité à un corps ρ_I , comme nous l'avons fait dans le cas classique et dans le cas quantique pour des particules de Boltzmann. Ceci

¹³Nous aurions également pu utiliser une autre définition de l'opérateur déplacement en énergie, en introduisant l'exponentielle d'une somme plutôt que le produit d'exponentielles :

$$[1 + (\eta \rho_I)^{-1}] = \eta e^{\beta(H_1(1) + \Delta(1) - \mu)}$$

Il apparaît dans la suite que, pour ces calculs, la définition (6.67) est plus pratique.

soulève deux problèmes : premièrement, nous devons construire une exponentielle à partir de la série infinie qui donne K ; deuxièmement, nous devons comprendre comment les opérateurs densité ρ_I apparaissent à la place des facteurs $[1 + \eta \rho_I(i)]$ qui semblent systématiquement présent dans chaque terme de la série. Nous allons voir que les deux problèmes se résolvent simultanément et que le résultat du calcul conduit à un regroupement systématique de tous les termes pour un système dense. Pour commencer, nous considérons un cas simple où seul le terme direct du champ moyen est pris en compte.

Terme direct Nous prenons à présent une expression approchée de l'équation (6.63) pour K en ne retenant que les diagrammes qui contiennent un seul U_2 , un seul U_3 , ... un seul U_l , ... et où tous les opérateurs U_l sont connectés à l cycles différents :

$$K = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \dots \quad (6.69)$$

De plus, nous remplaçons chaque opérateur d'Ursell U_l par sa partie réductible en arbre pour aboutir à l'équation :

$$\begin{aligned} K(1) = & z^2 \text{Tr}_2 \{U_2(1, 2) [1 + \eta \rho_I(2)]\} \\ & + \frac{z^3}{2!} \text{Tr}_{2,3} \{U_3^R(1, 2, 3) ([1 + \eta \rho_I(2)] [1 + \eta \rho_I(3)])\} \\ & + \dots \\ & + \frac{z^l}{(l-1)!} \text{Tr}_{2,\dots,l} \{U_l^R(1, \dots, l) [1 + \eta \rho_I(2)] \dots \times \\ & \times [1 + \eta \rho_I(l)]\} + \dots \end{aligned} \quad (6.70)$$

Pour simplifier le calcul, nous remplaçons les opérateurs U_l^R par leur partie non-symétrisée $\hat{U}_l^R$ (voir l'équation (6.32)) ; ceci n'a pas de conséquence sur le résultat final puisque nous vérifions à la fin du calcul que nous obtenons un opérateur Hermitien. Si nous représentons graphiquement les $\sqrt{U_1}$'s par des rectangles verticaux, les U_1 's par des carrés et les multiplications par $[1 + \eta \rho_1]$ par de longs rectangles horizontaux comme dans la Fig. 6.5, alors l'équation (6.70) correspond à :

$$\begin{aligned} K(1) = & \frac{z}{1!} \times \text{Diagram 1} + \\ & + \frac{z^2}{2!} \left(\frac{2!}{2!} \times \text{Diagram 2} + \frac{2!}{1!} \times \text{Diagram 3} \right) + \dots \end{aligned} \quad (6.71)$$

Nous remarquons alors le même type d'auto-similarité que dans le cas de la statistique de Boltzmann. Il y a néanmoins deux différences. La première est que l'opérateur resommé dans les branches des arbres est maintenant K , ou plus précisément $zU_1 + K$ (le terme zU_1 est introduit par le 1 présent à chaque noeud mais absent du premier terme de la série) ; la deuxième est que cet opérateur est multiplié à droite par le facteur $[1 + \eta \rho_I]$, ce qui fait que nous obtenons le produit :

$$[zU_1 + K] \times [1 + \eta \rho_I] \quad (6.72)$$

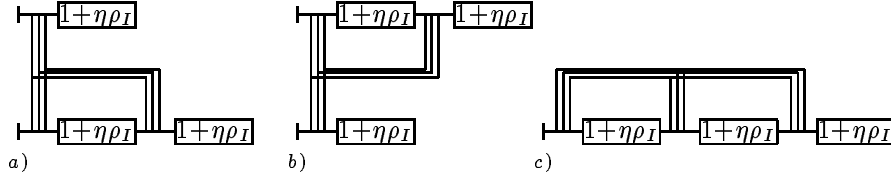


FIG. 6.6 – Diagrammes d'échange pour le cas $l = 3$; le terme direct à partir duquel ces diagrammes sont obtenus est le deuxième terme du membre de droite de l'équation (6.69).

L'équation (6.66) montre que ce produit est simplement égale à ρ_I . Nous aboutissons donc à :

$$K(1) = \sqrt{U_1(1)} [\exp (Tr_2 \{ \overline{U}_2(1,2) \rho_I(2) \}) - 1] \sqrt{U_1(1)} \quad (6.73)$$

(le -1 apparaît à cause de l'absence du premier terme du développement de l'exponentielle dans K). En insérant ce résultat dans (6.68), nous obtenons finalement

$$-\beta\Delta(1) = Tr_2 \{ \overline{U}_2(1,2) \rho_I(2) \} \quad (6.74)$$

qui est exactement le même résultat que pour la statistique de Boltzmann. Nous pouvons maintenant vérifier que le résultat est effectivement Hermitien et qu'il est donc justifié d'ignorer la symétrisation de l'opérateur $\widehat{U}_l^R$ au cours du calcul.

Terme d'échange Nous ajoutons maintenant les termes d'échange dans (6.69). Un exemple de terme d'échange est le deuxième terme du membre de droite de l'équation (6.63) : nous avons déjà remarqué que ce terme est obtenu en remplaçant $\overline{U}_2(1,2)$ par $\overline{U}_2(1,2)P_{ex}$ dans le terme direct de champ moyen. Autrement dit, la somme des deux termes (direct et échange) correspond à la substitution suivante :

$$\overline{U}_2(1,2) \Rightarrow \overline{U}_2(1,2) [1 + \eta P_{ex}(1,2)] = 2\overline{U}_2^{S,A}(1,2) \quad (6.75)$$

Plus généralement, la question est de savoir si chaque terme de la série complète de (6.71), qui conduira finalement à une exponentielle, contient tous les termes d'échange nécessaires à la substitution (6.75).

Pour construire les diagrammes qui sont les termes d'échange pour le champ moyen, il est utile de se rappeler de l'origine de chaque diagramme d'Ursell : un diagramme se construit de l'association d'un ensemble de U_l 's (avec $l \geq 2$) et de cycles d'échange; dans les diagrammes que nous avons considérés jusque là, un seul opérateur d'Ursell U_l est présent, et chacune des l particules est incluse dans un cycle différent ne contenant aucune autre particule. Nous considérons deux particule, i et k , qui sont initialement dans deux cycles différents; si nous appliquons alors l'opérateur d'échange $P_{ex}(i,j)$ au produit des deux cycles, nous

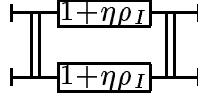


FIG. 6.7 – Un exemple de diagramme de corrélation où les cycles d'échange et les opérateurs d'Ursell se combinent pour créer une boucle. Ce diagramme fournit une contribution qui est au-delà du champ moyen.

obtenons un cycle plus grand dont la longueur est la somme des longueurs des cycles initiaux : les deux cycles se “soudent” en un. Ceci conduit immédiatement à un autre diagramme d'Ursell tel que les deux premiers représentés dans la Fig. 6.6 (a et b) pour le cas particulier $l = 3$. On peut alors répéter l'opération et appliquer un autre opérateur d'échange au résultat. Le résultat est que deux cycles de plus vont se souder en un plus grand ; de cette façon, nous obtenons un autre diagramme tel que le dernier de la Fig. 6.6 (c). L'introduction d'opérateurs d'échange peut être répétée jusqu'à ce que toutes les paires de particules contenues dans les liens $\overline{U}_2$ aient été échangées, ce qui conduit à un cycle de longueur maximale l contenant toutes les particules. Il y a $2^{l-1} - 1$ manières différentes de souder les différents cycles : elles produisent tous les diagrammes d'échange associés au diagramme direct initial.

Finalement, nous devons, dans chacun de ces diagrammes, remplacer U_l par la somme de produits d'opérateurs $\overline{U}_2$ qui correspondent à U_l^R , comme nous l'avons fait pour les termes directs ; nous remplaçons le “squelette” fourni par U_l par tous les arbres possibles. Le résultat de cette opération est le même que pour les termes directs : un branchement à la racine introduit un produit des opérateurs, alors qu'un branchement à un autre noeud introduit un produit de traces partielles. La situation n'est donc pas très différente de celle avec les termes directs, sauf que deux sortes de liens existent, avec ou sans échange ; la somme de la série crée donc l'exponentielle d'une somme. Nous obtenons finalement le résultat simple suivant

$$-\beta\Delta(1) = Tr_2 \left\{ \overline{U}_2(1, 2) [1 + \eta P_{ex.}(1, 2)] \rho_I(2) \right\} \quad (6.76)$$

qui montre que c'est la forme symétrisée de $\overline{U}_2$ qui apparaît naturellement dans l'expression du champ moyen.

Corrélations Peut-on aller plus loin dans l'exponentiation et essayer d'inclure dans le déplacement en énergie des termes tels que ceux associés au diagramme de la Fig. 6.7 ? Nous avons vu que la procédure d'exponentiation impose de considérer des opérateurs qui sont le carré, le cube, etc. de l'opérateur d'ordre le plus bas. Est-il possible de considérer un diagramme tel que celui de la Fig. 6.7, d'y introduire des opérateurs U_3 , de les remplacer par leur partie réductible en arbre et de montrer que le résultat est le carré de l'opérateur initial ? En fait, il semble que ce soit

impossible. Une raison est que le carré d'un opérateur tel que celui de la Fig. 6.7 impose à la particule 1 de faire partie de cycles indépendant, une situation qui ne se produit jamais dans un diagramme d'Ursell. Pour cette raison, nous n'avons donc pas été capable d'exponentier le diagramme de la Fig. 6.7. Une possibilité est de considérer cette classe de termes (ou de diagrammes) comme une petite correction au termes de champ moyen et de la traiter linéairement, comme cela est fait dans la Réf. [112]. Ceci est possible au-dessus de la température de condensation de Bose-Einstein, mais pas en-dessous comme nous le montrons plus loin. Nos calculs sont donc limités aux systèmes de Bose non-condensés.

Discussion physique

Nous avons déjà mentionné que l'opérateur déplacement en énergie $\Delta(1)$ rappelle l'opérateur de self-énergie dans le formalisme des fonctions de Green à température finie (voir le livre de Abrikosov et al. [118], par exemple). Il est néanmoins différent ; les self-énergies incorporent la notion de temps ou de fréquence ou de fréquence discrète de Matsubara, alors qu'il n'y a pas d'évolution temporelle dans le formalisme des opérateurs d'Ursell. Seules les propriétés à l'équilibre peuvent être obtenus ce qui exclut les fonctions de réponse linéaire, les modes collectifs et les quasiparticules. Autrement dit, seul l'opérateur densité à un corps à l'équilibre est calculé. Il contient moins d'information car il correspond à une fonction de Green, ou un propagateur à un corps, intégré sur toutes les fréquences. Il est néanmoins intéressant de voir comment le formalisme réussit à reconstruire des exponentielles, avec ou sans cycles d'échange, et qu'à la fin les expression de champ moyen se simplifient en introduisant l'opérateur densité à un corps de manière auto-cohérente. Nous insistons également sur le fait déjà mentionné que le champ moyen fait intervenir directement les éléments de matrice de l'opérateur $\overline{U}_2(1, 2)$ qui contient l'opérateur V_{12} dans une exponentielle, et pas l'opérateur V_{12} lui-même.

Bien sûr, la théorie de champ moyen n'est pas exacte : nous n'avons sommé qu'une classe limitée de diagrammes. De plus, nous avons remplacer les opérateur d'Ursell U_l par leur partie réductible en arbre U_l^R . Dans le système de Bose par exemple, on sait que les diagrammes de corrélation tels que celui de la Fig. 6.7 jouent un rôle essentiel juste au-dessus de la transition de Bose-Einstein, que la théorie prend un caractère non-perturbatif à la température de transition et qu'aucune limitation à un ensemble fini de diagrammes (ou une classe de diagramme) n'est possible en principe [112, 119]. Sous le point de condensation, la situation est encore plus dramatique. La raison en est que les "diagrammes en échelle" avec M barreaux, i.e. M opérateurs U_2 , sont proportionnels à $\mathcal{V}^{M-2}$, où $\mathcal{V}$ est le volume, à cause de la présence d'un état peuplé extensivement (le condensat), c'est-à-dire qu'ils divergent à la limite thermodynamique dès que $M \geq 3$: aussi faible que soit la constante de couplage entre bosons, ces termes dominent toujours les autres à la limite thermodynamique. Une situation similaire se produit avec les "diagrammes de bulles". En conséquence, comme nous avons négligé tous

ces diagrammes de corrélation, nos calculs ne sont valables que pour des systèmes de bosons non-condensés.

6.3 Conclusion

En conclusion, nous revenons sur le fait que la méthode développée ici permet en principe d'obtenir l'équation d'état du gaz de Bose ou de Fermi. En pratique le deuxième coefficient du Viriel, i.e. la première correction en densité au gaz parfait, s'exprime en fonction de l'opérateur d'Ursell à 2 particules qu'on peut calculer exactement à partir des déphasages du problème à deux corps. Ce calcul a été fait par Grüter et Laloë [106], qui retrouvent le deuxième coefficient du Viriel exact dont le calcul original est dû à Beth et Uhlenbeck [63]. Avec les résultats obtenus ici (voir par exemple l'équation (6.52) ou son équivalent incluant la statistique quantique, i.e. avec la substitution (6.75)), il est trivial d'étendre la démonstration au cas d'un gaz dense, c'est-à-dire sans supposer que la fugacité est petite. Les ordres supérieurs du développement du Viriel dépendent des opérateurs d'Ursell U_l à l particules avec $l \geq 3$. Ces opérateurs ne peuvent être connus exactement car le problème quantique à l corps correspondant n'est pas résolu à l'heure actuelle. Il serait néanmoins intéressant de comparer les résultats de la méthode des opérateurs d'Ursell, en prenant une expression approchée des opérateurs U_3 , avec les résultats partiels sur le troisième coefficient du Viriel obtenus par Païs et Uhlenbeck [120].

Une autre situation intéressante à considérer dans le formalisme des opérateurs d'Ursell est celle de l' ^4He . À pression atmosphérique, le gaz ^4He se condense en un liquide vers 4 K avant de devenir superfluide vers 2 K. La première transition de phase est une transition gaz-liquide, la deuxième peut être interprétée comme une transition de Bose-Einstein, suivant l'idée originale de London [121]. Mayer [19] a suggéré que la transition de phase gaz-liquide en mécanique statistique classique est liée à l'apparition d'agrégats extensifs. Plus tard, Feynman [122] a montré que la condensation de Bose-Einstein du gaz parfait de bosons est liée à l'apparition de cycles d'échanges extensifs. Dans le formalisme des opérateurs d'Ursell les agrégats sont formés de deux types de liens : des liens d'interaction – les opérateurs d'Ursell équivalents aux fonctions de Mayer de la mécanique classique – responsables de la condensation liquide et des liens statistiques – les cycles d'échange – responsables de la condensation de Bose-Einstein. Il est donc tentant d'appliquer la méthode des opérateurs d'Ursell à l'étude de ces deux transitions de phase et de voir en quoi la présence simultanée des deux types de liens modifie la transition gaz-liquide classique et la condensation de Bose-Einstein du gaz parfait en transitions ^4He gaz - ^4He liquide normal (^4He I) puis ^4He I - ^4He superfluide (^4He II).

Il est utile, à ce point, de rappeler le travail de Yang et Lee [107] qui ont montré que pour décrire la transition de phase gaz-liquide, il est nécessaire d'étudier l'équation d'état d'un système de taille finie et de ne prendre la limite thermodynamique qu'à la fin des calculs (i.e. après avoir resommé les agrégats de toutes tailles

l). Ils ont également montré que pour décrire cette transition de phase de manière exacte, et notamment pour pouvoir décrire la phase liquide, il n'est pas permis de tronquer le développement de l'équation d'état en puissances de la densité. En effet, à la limite thermodynamique, la pression est une fonction non-analytique de la densité, à température fixée [115]. On ne peut donc écrire la pression comme somme d'une série entière de la densité, ce qui est pourtant l'hypothèse à la base du développement du Viriel (6.8). Pour obtenir une description qualitative, on peut néanmoins écrire une équation d'état approchée et corriger le résultat par des considérations thermodynamiques générales (voir le théorème de Van Hove exposé dans la Réf. [115]), comme le montre l'exemple bien connu de la construction de Maxwell pour l'équation d'état de Van der Waals (voir Réf. [31] par exemple). La description de la condensation de Bose-Einstein pose également problème, comme nous l'avons expliqué dans le paragraphe 6.2.2. Là aussi, il faut garder des agrégats, i.e. des cycles d'échange dans ce cas, de toutes les tailles l et il n'est pas possible de tronquer la série. On pourrait envisager d'écrire un modèle qualitatif, "à la Van der Waals", qui serait une synthèse des idées de Mayer et de Feynman. Nous ne l'avons pas encore fait et gardons ce problème pour des travaux futurs.

Dans les appendices qui suivent, nous présentons deux applications de la méthode des opérateurs d'Ursell, et plus généralement des idées du développement en agrégats en mécanique quantique. Le premier appendice concerne la statistique des cycles d'échange d'un condensat de Bose-Einstein (BEC) et son lien avec la fraction condensée. Le deuxième présente une étude, qui n'a pas aboutie de la transition superfluide dans un gaz de Fermi attractif.

Annexe A

Fraction condensée et statistique des cycles d'échange d'un condensat de Bose-Einstein

F. London a le premier eu l'intuition que la superfluidité de l' ^4He était liée à la condensation de Bose-Einstein [121]. En formalisant cette idée, Matsubara [123] et indépendamment Feynman [124] ont montré que la fonction de partition canonique du liquide de Bose en interaction – i.e. un modèle de l' ^4He liquide – pouvait, avec quelques approximations, se ramener à une forme similaire à celle du gaz parfait et donc décrire la transition superfluide λ comme une condensation de Bose-Einstein. En faisant intervenir la notion de cycles d'échange ou boucles, ils ont écrit la fonction de partition comme une somme sur les configurations d'un gaz de boucles ("loop gas" en anglais). Dans ce langage, la transition de Bose-Einstein correspond à l'apparition de cycles d'échange macroscopiques, i.e. dont la taille est proportionnelle au nombre de particules. Plus tard, Penrose et Onsager [125] ont défini un critère précis pour la condensation de Bose-Einstein dans un système en interaction et suggéré que la fraction condensée pouvait être reliée à l'occupation des cycles d'échange les plus grands [126]. Pour le gaz parfait, le nombre de particules dans le condensat est donné, dans la limite thermodynamique, par la taille du plus grand cycle d'échange occupé.

En 1986, un résultat très intéressant a été démontré par Pollock et Ceperley [22]. Ils ont obtenu un lien exact entre la fraction superfluide et le nombre d'enroulements des cycles d'échange d'un fluide de Bose en interaction. Les enroulements sont définis pour un système homogène dans une boîte avec des conditions aux bords périodiques : ils correspondent aux cycles d'échange qui utilisent les conditions aux bords pour se refermer. L'utilité de ce résultat est de permettre un calcul très efficace de la fraction superfluide dans la méthode Path Integral Monte-Carlo (PIMC) [127].

L'idée à l'origine du travail présenté dans cet appendice est de relier la fraction condensée d'un condensat de Bose-Einstein à la statistique des enroulements

des cycles d'échange¹. Nous commençons par rappeler des résultats connus sur la statistique des cycles d'échange et notamment la taille des grands cycles. Nous présentons ensuite brièvement le résultat de Pollock et Ceperley sur la fraction superfluide, avant de discuter de la relation entre la statistique des enroulements et la fraction condensée.

A.1 Taille des cycles

Dans ce paragraphe, nous commençons par rappeler des résultats sur la statistique des cycles d'échange d'un fluide de Bose en dimension D (le plus souvent $D = 3$). Nous considérons N bosons dans une boîte cubique de volume $\mathcal{V} = L^D$ avec des conditions aux bords périodiques. Leur dynamique est décrite par le Hamiltonien :

$$H_N = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i < j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (\text{A.1})$$

Plutôt que de travailler dans l'espace de Hilbert des états totalement symétriques de N bosons, nous utilisons l'espace de Hilbert de N particules distinguables et symétrisons explicitement les vecteurs d'états à l'aide de l'opérateur :

$$S_N = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \quad (\text{A.2})$$

où les P_{α} sont les opérateurs de permutations de N particules. La fonction de partition canonique à température² $T = 1/\beta$ s'écrit alors :

$$Z_N = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \text{Tr}_{1,\dots,N} \{ P_{\alpha} e^{-\beta H_N} \} \quad (\text{A.3})$$

Comme toute permutation peut se décomposer de manière unique en un produit de cycles, on peut remplacer la somme sur les permutations par une somme sur les configurations $\{m_l\}$ de cycles d'échange, à un facteur de comptage près. Une configuration de cycles est caractérisée par les nombres $\{m_1, m_2, \dots, m_N\}$ de cycles d'échanges de taille 1, 2, ..., N . Chaque configuration vérifie :

$$N = \sum_{l=1}^N l m_l \quad (\text{A.4})$$

La fonction de partition se réécrit :

$$Z_N = \sum'_{\{m_l\}} \left(\prod_l \frac{1}{m_l! l^{m_l}} \right) \text{Tr}_{1,\dots,N} \{ P_{\{m_l\}} e^{-\beta H_N} \} \quad (\text{A.5})$$

¹Le travail présenté dans cette annexe a été fait en commun avec Dimitri Gangardt.

²La constante de Boltzmann $k_B = 1$ dans cette annexe.

où le prime sur la somme signifie qu'elle est prise sur toutes les configurations $\{m_l\}$ de cycles d'échange qui vérifient la contrainte (A.4), et où $P_{\{m_l\}}$ est un des opérateurs de permutation correspondant à la configuration de cycles $\{m_l\}$. Sous cette forme, on dit que la fonction de partition décrit un gaz de boucles (ou de cycles d'échange) [128] en interaction. Nous insistons sur le fait que le système de N bosons est remplacé par un système de N particules distinguables qui ont la possibilité de participer à des cycles d'échange.

A.1.1 Gaz parfait

Dans le cas du gaz parfait se produit une grande simplification car le Hamiltonien s'écrit comme une somme de Hamiltoniens à une particule :

$$H_N = \sum_{j=1}^N H_1(j) \quad (\text{A.6})$$

En effet, dans la trace $Tr_{1,\dots,N}\{P_{\{m_l\}} \exp(-\beta H_N)\}$, les contributions des particules qui ne sont pas connectées par un cycle d'échange se factorisent :

$$Tr_{1,\dots,N}\{P_{\{m_l\}} e^{-\beta H_N}\} = \prod_l s_l^{m_l} \quad (\text{A.7})$$

où :

$$s_l \equiv Tr_1\{e^{-l\beta H_1(1)}\} \quad (\text{A.8})$$

La fonction de partition s'écrit alors [122] :

$$Z_N = \sum'_{\{m_l\}} \left(\prod_l \frac{s_l^{m_l}}{m_l! l^{m_l}} \right) \quad (\text{A.9})$$

Cette forme obtenue par Feynman est celle attendue pour un gaz de boucles sans interaction. A l'aide de cette expression, on peut faire la statistique des cycles d'échanges du gaz parfait [21, 129]. On trouve que le nombre moyen de particules dans les cycles de taille l est :

$$l \langle m_l \rangle = s_l \frac{Z_{N-l}}{Z_N} \quad (\text{A.10})$$

En dimension $D = 3$ et en l'absence de condensat, $l \langle m_l \rangle$ décroît très vite avec l et s'annule lorsque $l > l_{min} \sim N^{2/3}$. En présence d'un condensat, $l \langle m_l \rangle$ est encore une fonction décroissante de l , mais elle présente un plateau $l \langle m_l \rangle \simeq 1$ pour $l_{min} < l < l_{max} \sim N$. A la limite thermodynamique, on peut montrer que le nombre N_0 de particules dans le condensat est donné par la taille du plus long

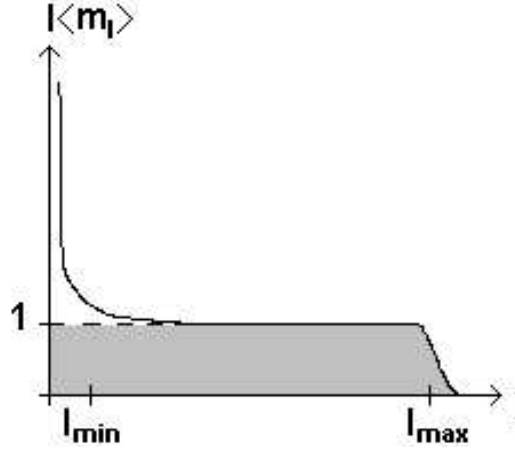


FIG. A.1 – La statistique des cycles d’échange du gaz parfait homogène en présence d’un condensat de Bose-Einstein de N_0 particules. Le nombre moyen de particules $l\langle m_l \rangle$ dans les cycles de taille l est représenté en fonction l . Les valeurs remarquables des longueurs de cycles sont $l_{min} \sim N^{2/3}$ et $l_{max} \simeq N_0$. La zone grisée est l’extrapolation du plateau entre $l = 1$ et l_{max} .

cycle occupé [21], i.e. la limite supérieure du plateau. La fraction condensée est alors :

$$\frac{N_0}{N} \simeq \frac{l_{max}}{N} \text{ quand } N \rightarrow \infty \quad (\text{A.11})$$

Le comportement qualitatif de $l\langle m_l \rangle$ en fonction de l , en présence d’un condensat, est représenté dans la Fig. A.1. Bien qu’il soit tentant de dire que le condensat correspond aux particules dans les grands cycles d’échange [129], en réalité toutes les tailles de cycles contribuent également au condensat, mais les longs cycles $l > l_{min}$ contribuent *uniquement* au condensat [130]. Les cycles qui participent au condensat sont représentés par la zone grisée dans la Fig. A.1.

A.1.2 Gaz en interaction

Nous étudions maintenant la statistique des cycles d’échange d’un gaz en interaction. Une première approche consiste à se ramener au cas du gaz parfait en écrivant de manière approchée le Hamiltonien sous la forme d’une somme de Hamiltoniens effectifs à une particule. C’est ce que permet par exemple de faire l’approximation du champ moyen de Hartree-Fock. Une autre approximation, mieux adaptée à un liquide proche de la transition superfluide, consiste à écrire le Hamiltonien comme celui d’un gaz parfait dont les particules ont une masse effective renormalisée par les interactions. Dans toutes ces approximations, la statistique des cycles d’échange reste qualitativement la même que pour le gaz parfait.

Une autre approche consiste à attaquer le problème de front et à revenir à

l'expression (A.5) de la fonction de partition, valable lorsqu'il y a des interactions entre bosons :

$$Z_N = \sum_{\{m_l\}} \left(\prod_l \frac{1}{m_l! l^{m_l}} \right) Tr_{1,...,N} \{ P_{\{m_l\}} e^{-\beta H_N} \} \quad (\text{A.12})$$

Pour calculer la trace dans l'expression précédente, on utilise, par exemple, le formalisme des intégrales de chemin en temps imaginaire [124, 127]. La trace est l'intégrale sur toutes les coordonnées $\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}$ des particules du propagateur à N particules :

$$Tr_{1,...,N} \{ P_{\{m_l\}} e^{-\beta H_N} \} = \int_{\mathcal{V}} d^D r_1 \dots \int_{\mathcal{V}} d^D r_N \langle \mathbf{r}_{P(1)}, \dots, \mathbf{r}_{P(N)} | e^{-\beta H_N} | \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \rangle \quad (\text{A.13})$$

En termes d'intégrales de chemin, le propagateur s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_{P(1)}, \dots, \mathbf{r}_{P(N)} | e^{-\beta H_N} | \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \rangle = & \quad (\text{A.14}) \\ \underbrace{\int_{\forall i=1 \text{ à } N: \mathbf{r}_i(\tau=0)=\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_i(\tau=\beta)=\mathbf{r}_{P(i)}} \mathcal{D}\mathbf{r}_1(\tau) \dots \int \mathcal{D}\mathbf{r}_N(\tau) \exp \left(- \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{d\mathbf{r}_i}{d\tau} \right)^2 + \sum_{i < j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right\} \right) \end{aligned}$$

où τ est le temps imaginaire qui va de 0 à β . Dans le langage des intégrales de chemin, on dit que les particules se déplacent entre les temps $\tau = 0$ et β sur une trajectoire appelée un chemin. La fonction de partition est calculée en sommant sur tous les chemins et sur tous les cycles d'échange possibles – voir les équations (A.12), (A.13) et (A.14). En l'absence de symétrisation, i.e. pour un gaz de Boltzmann, chaque particule se déplace sur un chemin fermé de taille³ $\sim \lambda_T$ appelé monomère. En présence des opérateurs de permutation, i.e. pour un gaz de Bose, les particules ont, de plus, la possibilité de participer à des cycles d'échange. Chaque particule peut parcourir soit un chemin fermé – un monomère – soit un chemin ouvert qui débute là où fini le chemin d'une particule et se termine là où commence celui d'une autre. Le premier cas est celui d'une particule qui ne participe pas à un cycle d'échange, le deuxième celui d'une particule qui participe à un cycle d'échange – on parle de polymère (“ring polymer” en anglais) [127]. Un polymère est un chemin fermé constitué des chemins ouverts de plusieurs particules à la suite les uns des autres. Ces notions seront utiles lorsqu'on discutera des enroulements.

Les intégrales de chemin se prêtent bien à des approximations et permettent de poursuivre analytiquement le calcul de la fonction de partition comme l'a montré Feynman dans son célèbre article sur la transition λ de l'⁴He [124]. Il est également

³Le chemin a l'apparence d'une trajectoire brownienne. La taille $\sim \lambda_T$ est la racine carrée de la distance quadratique moyenne parcourue par une particule.

possible de faire un calcul exact en évaluant numériquement les intégrales de chemin : c'est la méthode Path Integral Monte-Carlo (PIMC) développée notamment par Ceperley [127] pour étudier l' ^4He . Dans cette méthode, la fraction condensée est évaluée en calculant la plus grande valeur propre de l'opérateur densité à un corps, suivant le critère de Penrose et Onsager [125]. Cette manière d'obtenir la fraction condensée n'est pas très précise, en raison d'un grand bruit numérique, et demande un effort de calcul important. C'est pourquoi il est intéressant d'obtenir un moyen simple de calculer la fraction condensée à partir de la statistique des cycles, qui est elle facilement accessible dans un calcul PIMC.

Au cours des dernières années, la méthode PIMC a été utilisée pour calculer les propriétés du gaz de Bose dilué [129, 130, 131]. Dans ces travaux, la fraction condensée est évaluée à partir de la formule (A.11) reliant l'occupation du condensat à la taille du plus grand cycle occupé. Ce résultat n'est rigoureusement valable que pour le gaz parfait. Cependant, les calculs numériques semblent indiquer que «la relation entre la fraction condensée et la longueur des cycles n'est pas affectée au premier ordre par les interactions» [21]. Dans la suite, nous proposons une manière alternative de calculer la fraction condensée basée sur la notion d'enroulement des cycles.

Avant d'étudier les enroulements, nous remarquons qu'une alternative au formalisme des intégrales de chemin est la méthode des opérateurs d'Ursell. Cette méthode diagrammatique permet en effet de calculer la trace dans l'équation (A.12). En introduisant les opérateurs d'Ursell, Grüter et Laloë [106] ont obtenu une expression de la fonction de partition sous la forme de celle d'un gaz de boucles en interaction, voir les équations (13) et (20) dans [106]. Les interactions entre boucles ou cycles d'échange sont décrites par les opérateurs d'Ursell U_l , $l \geq 2$. En sélectionnant correctement des classes de diagrammes, il devrait être possible de faire la statistique des cycles d'échange du gaz de Bose interagissant et d'aller analytiquement au-delà de l'approximation du Hamiltonien effectif à une particule.

A.2 Enroulements des cycles

Le gaz de Bose homogène que nous étudions est contenu dans une boîte avec des conditions aux bords périodiques. Dans ce paragraphe, nous allons utiliser la topologie particulière de ce récipient – un tore si l'espace a deux dimensions – pour définir la notion d'enroulement des cycles d'échange. Nous commençons par résumer brièvement le travail de Pollock et Ceperley sur la fraction superfluide calculée à partir de la statistique des enroulements. Nous étudions ensuite l'existence d'un lien entre la fraction condensée et les enroulements.

A.2.1 Fraction superfluide et nombre d'enroulement

Nous allons à présent utiliser le formalisme des intégrales de chemin introduit plus haut pour discuter de l'influence de la topologie particulière du récipient qui contient le gaz de Bose. Lorsqu'un polymère correspond à un cycle d'échange contenant beaucoup de particules, il a la possibilité de se refermer en faisant un enroulement⁴, i.e. en utilisant les conditions aux bords périodiques de la boîte. En d'autres termes, un polymère enroulé ne peut se ramener à un point par une suite de transformations continues car la boîte avec des conditions aux bords périodiques est un espace non-simplement connexe.

A ce stade, il est utile de définir le vecteur déplacement de la particule j entre les temps $\tau = 0$ et β :

$$\mathbf{w}_j \equiv \frac{1}{L} \int_0^\beta d\tau \frac{d\mathbf{r}_j}{d\tau} = \frac{\mathbf{r}_j(\beta) - \mathbf{r}_j(0)}{L} \quad (\text{A.15})$$

Il est non nul seulement si la particule j appartient à un cycle d'échange, i.e. si son chemin n'est pas fermé. En ordre de grandeur $\langle \mathbf{w}_j^2 \rangle \sim \lambda_T^2/L^2$ pour le gaz parfait, car une particule se déplace d'environ une longueur d'onde thermique λ_T entre les temps $\tau = 0$ et β . La somme de tous les vecteurs $\mathbf{w}_j$ est appelée vecteur nombre d'enroulement du système ("winding number" en anglais) $\mathbf{W}$:

$$\mathbf{W} \equiv \sum_{j=1}^N \mathbf{w}_j \quad (\text{A.16})$$

Il décrit le nombre de fois que les chemins des N particules s'enroulent autour de la boîte avec les conditions aux bords périodiques. En ordre de grandeur $\langle \mathbf{W}^2 \rangle \sim N_0 \times \lambda_T^2/L^2$ pour le gaz parfait, car les cycles les plus longs contiennent $l_{\max} \simeq N_0$ particules.

Pollock et Ceperley [22] ont réussi à obtenir un résultat exact reliant la fraction superfluide ρ_s/ρ et la moyenne quadratique du nombre d'enroulement d'un gaz de Bose en interaction :

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \frac{2\pi}{\lambda_T^2} \frac{1}{n^{2/D} D} \frac{\langle \mathbf{W}^2 \rangle}{N^{\frac{D-2}{D}}} \quad (\text{A.17})$$

où n est la densité de particules. Pour le gaz parfait de Bose en dimension $D = 3$, on retrouve bien que la fraction superfluide est égale à la fraction condensée N_0/N [22]. L'idée à l'origine de ce calcul est d'utiliser les conditions aux bords périodiques dans une direction pour se ramener à la situation physique où le fluide est contenu entre deux récipients cylindriques. En imposant une différence de vitesse de rotation infinitésimale entre les deux cylindres, on définit la fraction normale ρ_n/ρ comme étant la fraction massique du fluide qui répond au mouvement des parois du récipient. La fraction superfluide est alors $\rho_s/\rho \equiv 1 - \rho_n/\rho$.

⁴Il peut aussi se refermer sans faire d'enroulement.

A.2.2 Fraction condensée et fraction enroulée

Nous allons maintenant établir un lien entre la fraction condensée et la statistique des enroulements. Pour le gaz parfait, nous allons démontrer que la fraction condensée est égale à la probabilité pour une particule de participer à un enroulement, ce que nous appelons la fractions enroulée. Nous commençons par des considérations générales sur le gaz en interaction.

Généralités

Penrose et Onsager [125] ont montré que l'objet fondamental à considérer dans le calcul de la fraction condensée est l'opérateur densité à un corps ρ_1 , dont la définition est :

$$\rho_1 \equiv N \text{Tr}_{2,\dots,N}[\rho_N] \quad (\text{A.18})$$

où $\rho_N = Z_N^{-1} \exp(-\beta H_N) S_N$ est l'opérateur densité à N corps et où $S_N = N!^{-1} \sum_{\alpha} P_{\alpha}$ est l'opérateur de symétrisation. Le nombre N_0 de particules dans le condensat est donné par la plus grande valeur propre de ρ_1 .

Pour faire apparaître la notion de fraction enroulée, il va être utile de distinguer deux espaces contenant les N particules – l'un de volume fini $\mathcal{V} = L^D$ et l'autre de volume infini. Ces deux espaces sont associés à la boîte cubique de volume $\mathcal{V}$ sans conditions aux bords périodiques, que nous appelons boîte primitive. Par exemple, lorsque $D = 1$, la boîte primitive est un segment de longueur L .

Le premier espace est celui de la boîte avec des conditions aux bords périodiques : c'est la boîte primitive dont on a identifié les bords opposés. C'est un espace non-simplement connexe, que nous appelons espace enroulé. Lorsque $D = 1$, il s'agit du cercle de périmètre L . Les objets définis dans cet espace seront signalés par un exposant $(\mathcal{V})$.

Le deuxième espace est obtenu en "déroulant" l'espace enroulé. Il est constitué d'une infinité de copies de la boîte primitive – les boîtes images – attachées par leurs bords. Lorsque $D = 1$, il s'agit d'une ligne infinie obtenue en collant bout à bout les boîtes images, qui sont des segments de longueur L . C'est un espace simplement connexe de volume infini, que nous appelons espace déroulé. Les objets définis dans cet espace seront signalés par un exposant (∞) . Un polymère enroulé dans le premier espace correspond, dans l'espace déroulé, à un polymère ouvert dont la première extrémité est dans la boîte primitive et dont l'autre est à une position image.

Il est important de réaliser que le Hamiltonien dans l'espace enroulé $H_N^{(\mathcal{V})} \equiv H_N$ est différent de celui dans l'espace déroulé $H_N^{(\infty)}$:

$$H_N^{(\infty)} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^D} \sum_{i < j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j + L\mathbf{n}|) \quad (\text{A.19})$$

En effet, dans l'espace déroulé les interactions sont non-locales car chaque particule interagit non seulement avec chaque autre particule mais aussi avec toutes les

images de ces autres particules. Il existe donc des corrélations à longue portée dans l'espace déroulé.

Nous cherchons à présent à calculer la matrice densité à un corps, i.e. le propagateur d'une particule, dans l'espace enroulé en fonction de celle dans l'espace déroulé. Les propriétés de l'intégrale de chemin permettent d'écrire le propagateur de N bosons dans l'espace enroulé en fonction du propagateur dans l'espace déroulé [21] :

$$\langle \mathcal{X}' | \exp(-\beta H_N^{(\mathcal{V})}) S_N | \mathcal{X} \rangle = \sum_{\mathcal{W}} \langle \mathcal{X}' | \exp(-\beta H_N^{(\infty)}) S_N | \mathcal{X} + L\mathcal{W} \rangle \quad (\text{A.20})$$

où $\mathcal{X}, \mathcal{X}' \in]-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]^{DN}$ désignent des vecteurs positions du système de N particules et où le vecteur $\mathcal{W} \in \mathbb{Z}^{DN}$ décrit le déplacement des particules vers les boîtes images⁵ :

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \\ \dots \\ \mathbf{n}_N \end{pmatrix} \quad (\text{A.21})$$

L'expression précédente permet d'écrire la matrice densité à N corps sous la forme :

$$\rho_N^{(\mathcal{V})}(\mathcal{X}'; \mathcal{X}) = \frac{Z_N^{(\infty)}}{Z_N^{(\mathcal{V})}} \sum_{\mathcal{W}} \rho_N^{(\infty)}(\mathcal{X}'; \mathcal{X} + L\mathcal{W}) \quad (\text{A.22})$$

En traçant sur toutes les particules sauf celle numérotée 1 et en multipliant par N , on obtient la matrice densité à 1 corps :

$$\rho_1^{(\mathcal{V})}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n}} R_L^{(\infty)}(\mathbf{x}', \mathbf{x} + L\mathbf{n}) \quad (\text{A.23})$$

où $\mathbf{x}', \mathbf{x} \in]-L/2; L/2]^D$ et où on a défini le propagateur à une particule dans l'espace déroulé⁶ :

$$\begin{aligned} R_L^{(\infty)}(\mathbf{x}', \mathbf{x} + L\mathbf{n}_1) &\equiv \frac{Z_N^{(\infty)}}{Z_N^{(\mathcal{V})}} N \sum_{\mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{n}_N} \int_{\mathcal{V}} d^D \mathbf{r}_2 \dots \int_{\mathcal{V}} d^D \mathbf{r}_N \\ &\times \rho_N^{(\infty)}(\mathbf{x}', \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{x} + L\mathbf{n}_1, \mathbf{r}_2 + L\mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{r}_N + L\mathbf{n}_N) \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

⁵Le vecteur $\mathbf{n}_i$ est le nombre d'enroulement du polymère auquel participe la particule i . Ce n'est pas la même quantité que le nombre d'enroulement du système de N particules $\mathbf{W}$, ni que le déplacement $\mathbf{w}_i$ de la particule i définis dans le paragraphe sur la fraction superfluide.

⁶De la définition de la fonction $R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$ découlent les propriétés suivantes :

- $R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x}) \geq 0, \forall \mathbf{x}$ (qui est évident lorsqu'on écrit $R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$ sous forme d'intégrale de chemin)
- $R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$ décroît vers 0 plus vite que $1/x^D$ quand $x \rightarrow \infty$, à $\mathcal{V}$ fixé (car la série de la relation (A.23) est convergente)

L'indice L est là pour rappeler que $R_L^{(\infty)}(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ dépend de L , notamment à travers les corrélations non-locales mentionnées plus haut. L'équation (A.23) signifie physiquement que la probabilité pour une particule de se propager de $\mathbf{x}$ à $\mathbf{x}'$ entre les temps $\tau = 0$ et $\tau = \beta$ dans l'espace enroulé est égale à la somme des probabilités de le faire sans enroulement ($\mathbf{n} \neq 0$), avec un enroulement, avec deux enroulements, etc.

En soustrayant l'équation (A.23) pour $\mathbf{x}' = \mathbf{x} = \mathbf{0}$ de la même équation pour $\mathbf{x}' = 0$ et $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, on obtient :

$$\rho_1^{(\nu)}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) - \rho_1^{(\nu)}(\mathbf{0}, \mathbf{x}) = R_L^{(\infty)}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) - R_L^{(\infty)}(\mathbf{0}, \mathbf{x}) + \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \left[R_L^{(\infty)}(\mathbf{0}, L\mathbf{n}) - R_L^{(\infty)}(\mathbf{0}, \mathbf{x} + L\mathbf{n}) \right] \quad (\text{A.25})$$

A partir de maintenant, l'objectif est de calculer la limite de l'équation précédente lorsque $\mathcal{V} = L^D \rightarrow \infty$ ⁷ et $x = |\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ de telle sorte que $x \leq \frac{L}{2}$. Nous voulons montrer que dans cette limite, l'équation (A.25) devient :

$$n - n_0 \simeq R_L^{(\infty)}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) \text{ quand } N \rightarrow \infty \quad (\text{A.26})$$

où $n \equiv \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} N/\mathcal{V}$ est la densité totale et $n_0 \equiv \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} N_0/\mathcal{V}$ est la densité du condensat. Comme d'après l'équation (A.23) :

$$n \simeq \rho_1^{(\nu)}(0, 0) = \sum_{\mathbf{n}} R_L^{(\infty)}(0, L\mathbf{n}) \text{ quand } N \rightarrow \infty \quad (\text{A.27})$$

on en déduit que la fraction condensée est :

$$\frac{n_0}{n} \simeq \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} R_L^{(\infty)}(\mathbf{0}, L\mathbf{n}) \text{ quand } N \rightarrow \infty \quad (\text{A.28})$$

Le membre de droite de l'équation précédente est la probabilité pour une particule de faire partie d'un cycle d'échange avec un nombre d'enroulement non-nul ($\mathbf{n} \neq \mathbf{0}$). C'est ce que nous appelons la fraction enroulée. C'est une quantité aisée à calculer dans une simulation PIMC car elle est égale à la fraction de particules dans les polymères enroulés. L'équation (A.28) signifie que la fraction condensée est égale à la fraction enroulée, dans la limite thermodynamique.

Il reste à montrer que la limite de l'équation (A.25) est bien donnée par l'équation (A.26). On sait que :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \rho_1^{(\nu)}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \rho_1^{(\nu)}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = n \quad (\text{A.29})$$

La définition de Penrose et Onsager de la condensation de Bose-Einstein dans un système homogène montre que :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \rho_1^{(\nu)}(\mathbf{0}, \mathbf{x}) = n_0 \quad (\text{A.30})$$

⁷C'est-à-dire aussi lorsque $N \rightarrow \infty$ à densité n fixée. C'est le limite thermodynamique.

qui traduit l'ordre non-diagonal à longue portée (ODLRO). Nous allons à présent faire deux hypothèses, dont nous discutons dans la suite, sur la fonction $R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$:

(1) On *suppose* que $\lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$ est une fonction lisse et décroissante de x quand $x \rightarrow \infty$. On peut alors utiliser un développement de Taylor de $R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x} + L\mathbf{n})$ au deuxième ordre dans la variable x/L et montrer que :

$$\sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left[R_L^{(\infty)}(0, L\mathbf{n}) - R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x} + L\mathbf{n}) \right] \simeq cte \times \frac{x^2}{L^2} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} R_L^{(\infty)}(0, L\mathbf{n}) \quad (\text{A.31})$$

De plus, comme :

$$\sum_{\mathbf{n} \neq 0} R_L^{(\infty)}(0, L\mathbf{n}) < n \quad (\text{A.32})$$

on obtient que :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left[R_L^{(\infty)}(0, L\mathbf{n}) - R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x} + L\mathbf{n}) \right] = 0 \quad (\text{A.33})$$

(2) On *suppose*, de plus, que ⁸ :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x}) = 0 \quad (\text{A.35})$$

En injectant les quatres relations (A.29), (A.30), (A.33) et (A.35) dans l'équation (A.25), on obtient bien la limite annoncée, équation (A.26). Il reste à comprendre dans quels cas les deux hypothèses faites sont justifiées.

Gaz parfait

Dans le cas du gaz parfait, on peut calculer explicitement $R^{(\infty)}(0, \mathbf{x}) \equiv \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$ et montrer que les deux hypothèses sont vérifiées. En effet, il est possible de réécrire la matrice densité à un corps grâce à la formule sommatoire de Poisson [132] :

$$\rho_1^{(\mathcal{V})}(0, \mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{\exp\{\beta(e_{\mathbf{k}} - \mu)\} - 1} = \sum_{\mathbf{n}} \int \frac{d^D \mathbf{q}}{(2\pi)^D} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} + L\mathbf{n}))}{\exp\{\beta(e_{\mathbf{q}} - \mu)\} - 1} \quad (\text{A.36})$$

où les vecteurs d'ondes $\mathbf{k}$ sont quantifiés dans la boîte avec conditions aux bords périodiques, les vecteurs d'ondes $\mathbf{q}$ forment un continuum, $e_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ est l'éner-

⁸Comme la série de la relation (A.23) converge, on remarque que lorsqu'on inverse l'ordre des limites :

$$\lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \lim_{x \rightarrow \infty} R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x}) = 0 \quad (\text{A.34})$$

gie du mode $\mathbf{k}$ et μ est le potentiel chimique⁹ du gaz parfait de Bose¹⁰. D'après l'équation (A.23), on voit que :

$$R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x}) = \int \frac{d^D \mathbf{q}}{(2\pi)^D} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x})}{\exp\{\beta(e_q - \mu)\} - 1} \quad (\text{A.37})$$

L'expression précédente montre que, dans le cas du gaz parfait, la seule dépendance de $R_L^{(\infty)}$ avec L est due au potentiel chimique μ , ce qui se comprend car il n'y a de corrélations entre particules distinguables en l'absence d'interactions. En effet, en présence du condensat, en dimension $D = 3$, on a :

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} \simeq -\frac{1}{\beta\mu} \quad (\text{A.38})$$

On peut maintenant calculer le comportement de $R^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$ lorsque $x \rightarrow \infty$ en utilisant l'équation (A.37) avec $\mu = 0$. On commence par calculer l'intégrale angulaire sur l'orientation du vecteur $\mathbf{q}$:

$$\begin{aligned} R^{(\infty)}(0, \mathbf{x}) &= \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x})}{\exp\{\beta e_q\} - 1} \\ &= \frac{1}{2\pi^2 x} \int_0^\infty dq \frac{q \sin(qx)}{e^{q^2 \lambda_T^2 / 4\pi} - 1} \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Lorsque $x \rightarrow \infty$:

$$R^{(\infty)}(0, \mathbf{x}) \sim \frac{2}{\pi \lambda_T^2 x} \int_0^\infty dq \frac{\sin(qx)}{q} = \frac{1}{\lambda_T^2 x} \quad (\text{A.40})$$

⁹Nous utilisons ici l'ensemble grand canonique pour le calcul des populations des modes d'ondes planes. A la limite thermodynamique, il n'y a pas de différence avec les populations calculées dans l'ensemble canonique.

¹⁰Dans le traitement standard de la condensation de Bose-Einstein du gaz parfait (voir [44] par exemple), on écrit la densité totale comme la somme sur les populations des états $\mathbf{k}$ et on remplace cette somme par une intégrale :

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp\{\beta(e_k - \mu)\} - 1} \simeq \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\exp\{\beta(e_q - \mu)\} - 1}$$

On montre ensuite que le remplacement de la somme par l'intégrale n'est possible qu'au-dessus d'une certaine température – la température critique. En-dessous de la température critique, le remplacement n'est pas justifié et on identifie la différence entre la somme et l'intégrale à la densité du condensat. En comparant avec l'équation (A.36) pour $\mathbf{x} = 0$, on voit que la différence entre la densité totale – donnée par la somme sur $\mathbf{k}$ – et l'intégrale sur $\mathbf{q}$ est donnée par la série :

$$\sum_{\mathbf{n} \neq 0} \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot L\mathbf{n})}{\exp\{\beta(e_q - \mu)\} - 1}$$

qu'on identifie, à la limite thermodynamique, avec la densité du condensat.

Comme $1/x$ est une fonction lisse, décroissante et qui tend vers 0 quand x tend vers ∞ , les deux hypothèses sont vérifiées. Ainsi, pour le gaz parfait, nous avons montré que la fraction condensée est égale à la fraction enroulée, dans la limite thermodynamique.

gaz en interaction

Est-ce que les deux hypothèses faites sur la fonction $R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$ sont valables dans le cas général du fluide interagissant ? En fait, on peut avancer un argument qui montre que ces hypothèses ne sont pas vérifiées dans un liquide [133]. En effet, dans un liquide, il existe des corrélations locales fortes¹¹, qui se traduisent dans l'espace déroulé par des corrélations non-locales entre une particule et ses positions images. On s'attend donc à ce que la probabilité pour une particule de se propager jusqu'à une position image de sa position initiale soit plus grande que celle de se propager jusqu'à une autre position dans la même boîte image. Ceci signifie que la fonction $R_L^{(\infty)}(0, \mathbf{x})$ présente un maximum local à chaque fois que $\mathbf{x}$ est de la forme $L\mathbf{n}$. Ce n'est donc pas une fonction décroissante de x , ce qui contredit la première hypothèse.

Ceperley [133] a évalué la fraction enroulée dans un calcul PIMC pour un modèle de l'⁴He liquide à $T = 1$ K et a obtenu 67%, alors que le résultat attendu pour la fraction condensée est $< 10\%$. Ceci confirme que le lien entre fraction condensée et fraction enroulée n'est pas valable de manière générale. Cependant, comme il est vérifié dans le cas du gaz parfait et que les corrélations locales sont beaucoup moins fortes dans un gaz dilué que dans un liquide, on peut s'attendre – comme pour la relation (A.11) entre occupation du condensat et taille du plus grand cycle occupé – à ce que l'égalité entre la fraction condensée et la fraction enroulée persiste au premier ordre des interactions. Pour obtenir un résultat plus général, il serait intéressant de faire une étude précise des corrélations locales pour modifier le calcul de la statistique des enroulements en présence d'interactions.

¹¹Par exemple, il existe autour de chaque atome, à cause de la répulsion de coeur dur, une sorte de cage de laquelle les autres atomes sont exclus.

Annexe B

Tentative d'étude de la transition superfluide d'un gaz de Fermi attractif avec la méthode des opérateurs d'Ursell

Dans cet appendice¹, nous considérons le problème du calcul de la température critique de la transition superfluide d'un gaz de Fermi attractif. Ce système est un modèle très simplifié d'un métal supraconducteur. Dans un tel métal, on sait depuis les travaux de Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) [23], que les électrons peuvent s'attirer grâce à la déformation dynamique du réseau cristallin à leur passage et former des paires faiblement liées – les paires de Cooper – qui subissent une condensation similaire, mais pas identique, à la condensation de Bose-Einstein. De manière générale, la théorie BCS permet de décrire la transition superfluide d'un gaz dilué de fermions dont l'interaction attractive est faible.

Récemment, quelques équipes expérimentales ont réussi à piéger des gaz d'atomes fermioniques et à les refroidir jusqu'à des températures de l'ordre de 10% de la température de Fermi [134, 135, 14]. En utilisant des pièges optiques, elles sont parvenues à confiner simultanément des fermions dans deux états de spin différents, dont l'interaction en onde s n'est pas interdite par le principe de Pauli. De plus, la longueur de diffusion entre ces deux états de spin peut être modifiée, grâce au mécanisme de résonance de Feshbach, en appliquant un champ magnétique. Il est alors possible de rendre l'interaction fortement attractive et d'espérer observer une transition superfluide analogue à celle de BCS mais dans le régime de couplage fort [136, 84].

La possibilité expérimentale d'étudier une transition superfluide dans un gaz de Fermi très bien caractérisé a relancé l'intérêt de la prédiction théorique de la température de transition pour un système fortement attractif [137, 138]. On

¹Le travail présenté dans cette annexe a été fait en commun avec Dimitri Gangardt.

s'attend à ce que la transition BCS, qui décrit bien le cas du gaz faiblement interagissant, évolue, quand le couplage augmente, vers une transition qui ressemble à une condensation de Bose-Einstein de paires de fermions fortement liés. Ceci réactualise les idées de Schafroth, Blatt et Butler [24] qui avaient eu l'intuition, dès 1954, que la transition supraconductrice était semblable à une condensation de Bose-Einstein de paires de fermions fortement liés – les paires de Schafroth. Dans le langage des opérateurs d'Ursell, cette idée se traduit naturellement par l'importance prise par les cycles d'échange de paires de fermions liés par des opérateurs d'Ursell U_2 . Dans cet appendice, nous présentons une tentative d'étude de la transition superfluide dans le formalisme des opérateurs d'Ursell en se basant sur l'idée de condensation de paires de fermions. Nous commençons par rappeler le calcul de la température critique BCS dans le formalisme des fonctions de Green à température finie [139, 118]. Ce travail est utile à la compréhension du calcul utilisant les opérateurs d'Ursell présenté à la suite.

B.1 Fonctions de Green à température finie

Nous rappelons le calcul de la température critique T_c de la transition BCS d'un gaz de Fermi attractif à partir de la fonction de partition grand canonique évaluée par la méthode des fonctions de Green à température finie [139, 118]. Ce calcul fournira un point de comparaison avec la méthode des opérateurs d'Ursell également basée sur l'évaluation de la fonction de partition grand canonique.

On considère un gaz de N fermions de spin $1/2$ en interaction attractive et sans état lié du problème à 2 corps. Les collisions ont lieu dans le régime de basse énergie et l'interaction en onde s n'existe donc qu'entre états de spin différents. Elle est décrite par la longueur de diffusion $a < 0$. En seconde quantification, le Hamiltonien du système est :

$$H_N = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger a_{\mathbf{k}, \alpha} + g_V \sum'_{\mathbf{K}, \mathbf{q}, \mathbf{p}} a_{\mathbf{K}+\mathbf{p}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{K}-\mathbf{p}, \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{K}-\mathbf{q}, \downarrow} a_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \uparrow} \quad (\text{B.1})$$

où $\alpha \in \{\uparrow, \downarrow\}$ désigne les deux états de spin. Le gaz est enfermé dans une boîte cubique de volume $\mathcal{V} = L^3$. L'interaction dans le Hamiltonien est décrite par g_V qui est la constante de couplage nue, i.e. l'élément de matrice du vrai potentiel V à basse énergie. Elle n'est pas reliée de manière simple à la longueur de diffusion a . Le ' sur la somme signifie que l'interaction attractive modélisée par la seule constante g_V ne peut exister pour toutes les énergies. Lorsque surviendra une divergence à haute énergie – divergence UV – il faudra donc introduire un cutoff. La fonction de partition grand canonique à température² $T = 1/\beta$ et à potentiel chimique μ

²La constante de Boltzmann $k_B = 1$ dans cette annexe.

est définie par :

$$Z_{gc}(T, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} Tr_{1,\dots,N} \left\{ e^{-\beta(H_N - \mu N)} \right\} \quad (\text{B.2})$$

Le formalisme des fonctions de Green à température finie permet le calcul du logarithme de la fonction de partition grand canonique sous la forme d'une somme de diagrammes [139, 118] . La transition BCS est obtenue en ne retenant que la classe de diagrammes en échelle [139, 140] :

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_{gc} = \text{diagramme 1} + \text{diagramme 2} + \dots \quad (\text{B.3})$$

Lorsqu'on resomme tous les diagrammes en échelle, on obtient :

$$\ln Z_{gc} = - \sum_{\mathbf{K}, \nu} \{ \ln (1 - Q(\mathbf{K}, \nu)) + Q(\mathbf{K}, \nu) \} \quad (\text{B.4})$$

où $Q(\mathbf{K}, \nu)$ est une fonction de l'impulsion totale $2\mathbf{K}$ de la paire de Cooper et de la fréquence de Matsubara totale $\omega_\nu = \nu 2\pi/\beta$ de la paire, avec ν entier relatif :

$$Q(\mathbf{K}, \nu) = \frac{|g_V|}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\{ \tanh(\beta \varepsilon_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}/2) + \tanh(\beta \varepsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{q}}/2) \} / 2}{\varepsilon_{\mathbf{K}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{q}} - i\nu 2\pi/\beta} \quad (\text{B.5})$$

où $2\mathbf{q}$ est l'impulsion relative de la paire et $\varepsilon_k \equiv \hbar^2 k^2 / 2m - \mu$. La transition superfluide correspond à la température à laquelle apparaît une divergence de Z_{gc} . Thouless [139] a montré qu'elle correspond au couple $(\mathbf{K}, \nu)$ tel que $|Q(\mathbf{K}, \nu)|$ soit maximal et égal à 1. Il est facile de voir que $|Q(\mathbf{K}, 0)| > |Q(\mathbf{K}, \nu)|$ quelque soit $\nu \neq 0$; Thouless a également montré que la divergence se produit pour $\mathbf{K} = 0$ [139]. Finalement la divergence apparaît lorsque :

$$1 - Q(\mathbf{K} = 0, \nu = 0) = 0 \quad (\text{B.6})$$

ce qui équivaut à :

$$\frac{1}{|g_V|} = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\tanh(\beta \varepsilon_q / 2)}{2\varepsilon_q} \quad (\text{B.7})$$

dans la limite thermodynamique. On a aussi :

$$\varepsilon_q \simeq \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - T_F \quad (\text{B.8})$$

car on sait que la température critique est beaucoup plus basse que la température de Fermi $T_c \ll T_F$ et le potentiel chimique μ peut donc être remplacé par sa limite à température nulle, i.e. l'énergie de Fermi T_F . En passant à une intégrale sur l'énergie ($d^3 q / (2\pi)^3 \rightarrow \nu(\varepsilon) d\varepsilon$), on obtient :

$$\frac{1}{|g_V| \nu_0} = \int d\varepsilon \sqrt{1 + \frac{\varepsilon}{T_F}} \frac{\tanh(\beta \varepsilon / 2)}{2\varepsilon} \quad (\text{B.9})$$

où $\nu(\varepsilon) = \nu_0 \sqrt{1 + \varepsilon/T_F}$ est la densité d'états et ν_0 est la densité d'états à la surface de Fermi.

L'intégrale de l'équation (B.9) est divergente à grande énergie (UV) car on n'a pas tenu compte pour l'instant du fait que l'attraction entre fermions n'existe que pour une certaine gamme d'énergie autour de l'énergie de Fermi. Pour traiter cette divergence, dans un métal supraconducteur, on impose généralement un cutoff à la main qui correspond à l'énergie de Debye des phonons du réseau cristallin. Ceci est justifié par le fait que l'interaction attractive entre électrons est transmise par les phonons. Dans un gaz atomique ultrafroid, il n'y a pas de raison d'imposer un tel cutoff. Gorkov et Melik-Barkhudarov [141] ont montré comment il est possible de resommer la matrice V en matrice de collision³ T et donc de remplacer la constante de couplage nue g_V par la constante de couplage physique $g \equiv 4\pi\hbar^2 a/m$ en éliminant la divergence UV. On considère l'équation de diffusion de deux fermions dans le vide :

$$\frac{1}{|g_V|} = \frac{1}{|g|} + \mathcal{P} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar^2 q^2/m - E} \quad (\text{B.10})$$

où $\mathcal{P}$ désigne la partie principale de l'intégrale et où E est une énergie positive ou nulle, arbitraire. En effet, l'équation précédente montre que la constante de couplage g ne dépend pas de E . On choisit donc la valeur $E = 2T_F$ qui simplifie la suite du calcul. En soustrayant (B.10) de (B.7) on obtient :

$$\frac{1}{|g|} = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left(\frac{\tanh(\beta\varepsilon_q/2)}{2\varepsilon_q} - \mathcal{P} \frac{1}{2\varepsilon_q} \right) = \mathcal{P} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{-1}{\varepsilon_q} \frac{1}{1 + \exp(\beta\varepsilon_q)} \quad (\text{B.11})$$

Cette intégrale est convergente. En passant à une intégrale sur l'énergie et en remplaçant la densité d'état $\nu(\varepsilon)$ par celle à la surface de Fermi ν_0 , on peut calculer l'intégrale dans la limite de faible couplage où $T_c \ll T_F$:

$$\frac{1}{|g|\nu_0} = \mathcal{P} \int_0^{+\infty} dx \frac{\sqrt{x}}{1-x} \frac{1}{1 + e^{(x-1)T_F/T_c}} \simeq \ln \left\{ \frac{8\gamma}{\pi e^2} \frac{T_F}{T_c} \right\} \quad (\text{B.12})$$

où $x \equiv (\varepsilon + T_F)/T_F$ et $\gamma \simeq 1.781$. On en tire l'expression suivante de la température critique [142] :

$$T_c = \frac{8}{e^2} \frac{\gamma}{\pi} T_F \exp \left(-\frac{1}{|g|\nu_0} \right) \quad (\text{B.13})$$

C'est une expression usuelle de la température de transition BCS :

$$T_c \sim T_{car.} \exp \left(-\frac{1}{|g|\nu_0} \right) \quad (\text{B.14})$$

³Plus précisément, il s'agit de resommer la matrice V en matrice de réaction R , qui a des éléments diagonaux réels alors que ceux de la matrice T sont complexes :

$$\frac{1}{R_l(q)} = \text{Re} \left[\frac{1}{T_l(q)} \right]$$

où $T_{car.} \simeq T_F$ est l'échelle d'énergie caractéristique du système, qui remplace pour un gaz atomique de Fermi la température de Debye des métaux. Cette expression est valable lorsque $T_c \ll T_{car.}$, i.e. lorsque $|g|\nu_0 \sim |a|n^{1/3} \ll 1$ où n est la densité de particules.

B.2 Méthode des opérateurs d'Ursell

A l'instar des fonctions de Green à température finie, la méthode des opérateurs d'Ursell permet d'écrire le logarithme de la fonction de partition grand canonique comme une somme de diagrammes [106]. Pour pouvoir faire un calcul analytique de la température de transition superfluide, il faut sélectionner une classe de diagrammes d'Ursell dont on pense que l'effet est prépondérant. Nous nous appuyons sur le calcul de Thouless, et sur certaines similarités connues entre le formalisme des fonctions de Green et celui des opérateurs d'Ursell [21], pour choisir de resommer la classe de diagrammes en échelle [143] :

$$\begin{aligned} \ln Z_{gc} &= \frac{1}{2} \times \text{Diagram 1} + \frac{1}{3} \times \text{Diagram 2} + \dots \\ &= -Tr_{1,2} \left\{ \ln \left(1 - z^2 \widehat{U}_2(1, 2) \right) + z^2 \widehat{U}_2(1, 2) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

où $z = e^{\beta\mu}$ est la fugacité et où $\widehat{U}_2$ est défini ⁴ par :

$$z^2 \widehat{U}_2(1, 2) \equiv \text{Diagram 3} = z^2 U_2(1, 2)(1 - f_I(1))(1 - f_I(2)) \quad (\text{B.16})$$

et où :

$$f_I(1) = \frac{z U_1(1)}{1 + z U_1(1)} \quad (\text{B.17})$$

est l'opérateur densité à un corps du gaz parfait de Fermi.

Soit $\{|\psi\rangle\}$ le spectre de vecteurs propres de l'opérateur $z^2 \widehat{U}_2$. L'équation (B.15) devient :

$$\ln Z_{gc} = - \sum_{\{|\psi\rangle\}} \left\{ \ln \left(1 - \langle \psi | z^2 \widehat{U}_2(1, 2) | \psi \rangle \right) + \langle \psi | z^2 \widehat{U}_2(1, 2) | \psi \rangle \right\} \quad (\text{B.18})$$

On voit que $\ln Z_{gc}$ diverge si la valeur propre maximale est supérieure ou égale à 1. Soit $|\varphi\rangle$ le vecteur propre de valeur propre maximale. Supposons que cette valeur propre maximale atteigne 1, alors :

$$\left(1 - z^2 \widehat{U}_2 \right) |\varphi\rangle = 0 \quad (\text{B.19})$$

⁴Ainsi défini, $\widehat{U}_2$ est un opérateur non-hermitique. Ceci n'a pas d'incidence sur la suite de ce calcul.

Si on suppose de plus que $|\varphi\rangle$ correspond à une impulsion totale nulle, on peut projeter sur la base des ondes planes⁵ d'impulsion relative $2\mathbf{q}$:

$$\langle \mathbf{q}, -\mathbf{q} | \varphi \rangle = \varphi_q = \sum_{\mathbf{q}'} \langle \mathbf{q}, -\mathbf{q} | U_2 | \mathbf{q}', -\mathbf{q}' \rangle f_{q'} f_{q'} e^{2\beta e_{q'}} \varphi_{q'} \quad (\text{B.20})$$

où $e_q = \hbar^2 q^2 / 2m$ et

$$f_q = \langle \mathbf{q} | f_I | \mathbf{q} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(e_q - \mu)} + 1} \quad (\text{B.21})$$

est le facteur de Fermi-Dirac.

Il s'agit à présent de résoudre l'équation aux valeurs propres (B.20) et de montrer que la valeur propre maximale atteint 1 pour une certaine température qu'on identifie à la température critique. Pour cela, il faut choisir une expression pour les éléments de matrice de U_2 . Nous avons fait trois choix :

(i) Une approximation de basse énergie :

$$\langle \mathbf{q}, -\mathbf{q} | U_2 | \mathbf{q}', -\mathbf{q}' \rangle \simeq -\frac{\beta g}{\mathcal{V}} \quad (\text{B.22})$$

(ii) Le premier ordre de la théorie des perturbations [144] :

$$\langle \mathbf{q}, -\mathbf{q} | U_2 | \mathbf{q}', -\mathbf{q}' \rangle \simeq -\frac{g}{\mathcal{V}} \frac{e^{-2\beta e_{q'}} - e^{-2\beta e_q}}{2(e_q - e_{q'})} \quad (\text{B.23})$$

(iii) L'expression exacte des éléments de matrice de U_2 pour un potentiel V qui est un puits carré sans état lié.

Le premier choix (i) permet de finir le calcul analytiquement et donne une température critique $\sim T_F |g| \nu_0$, ce qui ne correspond pas à la forme attendue (B.14). Le deuxième choix (ii), permet de réécrire l'équation (B.20) sous la forme :

$$\varphi_q = \frac{|g|}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}'} \varphi_{q'} f_{q'} f_{q'} \frac{e^{-2\beta e_{q'}} - e^{-2\beta e_q}}{2(e_q - e_{q'})} e^{2\beta e_{q'}} \quad (\text{B.24})$$

Or :

$$f_q f_q = \frac{1 - f_q - f_q}{\exp(\beta \varepsilon_q + \beta \varepsilon_q) - 1} = \frac{\tanh(\beta \varepsilon_q / 2)}{\exp(2\beta \varepsilon_q) - 1} \quad (\text{B.25})$$

où $\varepsilon_q \equiv e_q - \mu$. Donc :

$$\varphi_q = |g| \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \frac{\tanh(\beta \varepsilon_{q'} / 2)}{2(e_{q'} - e_q)} \frac{\exp(2\beta(e_{q'} - e_q)) - 1}{\exp(2\beta \varepsilon_{q'}) - 1} \varphi_{q'} \quad (\text{B.26})$$

Si on écrit l'équation (B.26) pour $q = k_F \equiv \sqrt{2m\mu}/\hbar$, on aboutit à :

$$\frac{1}{|g|} = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\tanh(\beta \varepsilon_q / 2)}{2\varepsilon_q} \frac{\varphi_q}{\varphi_{k_F}} \quad (\text{B.27})$$

⁵Les vecteurs d'onde sont quantifiés dans une boîte cubique de volume $\mathcal{V} = L^3$.

Cette équation ressemble beaucoup à l'équation BCS usuelle (B.7), à deux différences près. Premièrement, c'est la constante de couplage physique g qui apparaît à la place de la constante de couplage nue g_V . Deuxièmement, la fonction sous l'intégrale est multipliée par φ_q/φ_{k_F} . Comme φ_q/φ_{k_F} s'apparente à une fonction d'onde pour la paire de fermions, on peut penser qu'elle va introduire naturellement le cutoff nécessaire à la convergence de l'intégrale et permettre d'obtenir directement une équation similaire à (B.11). Pour le vérifier, nous avons diagonalisé l'opérateur $z^2\widehat{U}_2$ numériquement pour les choix (ii) et (iii) et constaté que le vecteur propre φ_q ne joue *pas* le rôle attendu : la valeur propre maximale atteint 1 pour une température critique qui n'est pas de la forme (B.14)⁶.

B.3 Conclusion

En conclusion, nous n'avons pas réussi à obtenir la température de transition superfluide d'un gaz de Fermi attractif avec la méthode des opérateurs d'Ursell. Nous avons choisi une classe de diagrammes – diagrammes en échelle – et mené le calcul de la température critique avec divers choix pour l'opérateur U_2 . Dans tous les cas, on trouve une divergence de la fonction de partition qui signale une transition de phase liée à la formation de paires. Cependant la température critique n'est pas de la forme attendue (B.14) dans la limite de faible couplage.

Le problème vient donc sans doute du choix de la classe de diagrammes. En effet, on peut imaginer qu'en considérant plus de diagrammes, il soit possible de “faire monter” les facteurs $1-f_I$ dans les exponentielles⁷ et d'aboutir à un opérateur de la forme :

$$\begin{aligned} z^2\widetilde{U}_2(1,2) \equiv & \exp \left[-\beta(1-f_I)(H_2(1,2) - 2\mu)(1-f_I) \right] \\ & - \exp \left[-\beta(1-f_I)(H_1(1) + H_1(2) - 2\mu)(1-f_I) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

à la place de :

$$\begin{aligned} z^2\widehat{U}_2(1,2) = & (1-f_I) \left\{ \exp \left[-\beta(H_2(1,2) - 2\mu) \right] \right. \\ & \left. - \exp \left[-\beta(H_1(1) + H_1(2) - 2\mu) \right] \right\} (1-f_I) \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Il s'agirait ensuite de montrer que la valeur propre maximale de $z^2\widetilde{U}_2$ atteint 1 à une température T_c de la forme attendue.

⁶Le calcul numérique a consisté à discrétiser l'équation aux valeurs propres de l'opérateur $z^2\widehat{U}_2$ pour le diagonaliser. Dans la limite thermodynamique (en faisant varier le volume du système) et pour les différentes approximations (i), (ii) et (iii) des éléments de matrice de U_2 , nous avons étudié le comportement de la plus grande valeur propre. C'est une fonction de T_F/T qui atteint 1 lorsque $T = T_c$. Nous avons vérifié que T_c/T_F ainsi obtenu n'a pas le comportement attendu $\exp(-1/|g|\nu_0)$ en fonction de la constante de couplage g .

⁷Par une technique d'exponentiation analogue à celle employée dans le chapitre sur les systèmes denses.

On peut avancer un argument basé sur le problème de Cooper [145]. Cooper a montré qu'il existe un état lié, d'énergie $\varepsilon_{cooper} < 0$, du problème à deux corps en présence de la mer de Fermi. Ceci signifie que la valeur propre la plus basse de $(1 - f_I)(H_2 - 2\mu)(1 - f_I)$ à $T \simeq 0$ est ε_{cooper} . On peut alors montrer que la valeur propre maximale (vpmax) de l'opérateur $z^2\tilde{U}_2$ est approximativement donnée par l'état lié du problème de Cooper :

$$\text{vpmax}\{z^2\tilde{U}_2\} \sim \exp(\beta|\varepsilon_{cooper}|) - 1 \quad (\text{B.30})$$

Cette valeur propre atteint 1 lorsque :

$$T_c \sim \varepsilon_{cooper} \sim T_{car.} \exp\left(-\frac{2}{|g|\nu_0}\right) \quad (\text{B.31})$$

Cet argument montre qu'on peut espérer obtenir la forme habituelle de la température critique BCS, en considérant une classe de diagrammes plus grande que celle des échelles et permettant de faire apparaître les facteurs de blocage de Pauli $1 - f_I$ directement à côté du Hamiltonien à deux corps H_2 . Ce calcul n'a pas encore été fait.

Conclusion

Dans ce manuscrit ont été exposés divers résultats sur la mécanique statistique des gaz froids. Dans la première partie, concernant les propriétés de transport des gaz avec des niveaux internes, nous avons montré comment, en généralisant la théorie cinétique de Lhuillier et Laloë [3], on peut écrire une équation de transport incluant tous les termes de champ moyen. Ce résultat a été obtenu en écrivant une équation opératorielle basée sur l'ansatz de matrice S , puis en poursuivant le développement en gradients de la transformée de Wigner jusqu'au premier ordre. Il serait utile de prolonger ce travail en faisant une comparaison systématique, aux différents ordres du développement en gradients, de l'ansatz de matrice S et de celui d'Yvon-Snider. Ceci permettrait de connaître le domaine de validité de ces deux approches et d'indiquer leurs différences. Le cas échéant, on pourrait envisager des expériences permettant de tester ces différences.

Par la suite, nous avons vu qu'une des principales conséquences de l'indiscernabilité quantique sur le transport dans les gaz atomiques froids est l'effet de rotation des spins identiques (ISRE). Ce dernier crée le champ moyen de spin responsable de deux phénomènes discutés plus en détail dans ce manuscrit : les ondes de spin et l'instabilité de Castaing. L'ISRE se produit lors d'une collision vers l'avant de deux particules indiscernables dont les polarisations ne sont pas parallèles. En extrapolant, il est tentant de se demander si la collision de deux solitons d'onde de matière dont les polarisations ne sont pas parallèles donne lieu à un effet similaire [146]. A l'heure actuelle, nous ne disposons pas d'une réponse théorique claire. Une expérience est sans doute envisageable car des solitons ont récemment été réalisés à partir de condensats de Bose-Einstein attractifs [147].

Un autre prolongement théorique de notre travail serait l'étude de la modification du comportement des ondes de spin dans un gaz de Bose lorsque la température baisse et qu'on passe d'un gaz non-dégénéré à un condensat de Bose-Einstein à température nulle. Les ondes de spin ont été étudiées, théoriquement et expérimentalement, au dessus de la transition de Bose-Einstein et à température nulle. Le mécanisme physique est différent dans ces deux régimes et la façon dont on passe de l'un à l'autre n'est pas connue. Nikuni et Williams [60] ont récemment écrit une théorie cinétique qui devrait permettre d'explorer ce problème.

Toujours dans un gaz froid avec deux niveaux internes, Lhuillier et Laloë [7] ont prédit l'existence d'un couplage entre transport de chaleur et transport de

spin. Il serait intéressant de mener une étude théorique détaillée d'une situation réalisable expérimentalement mettant en évidence ce phénomène dans un gaz atomique ultrafroid piégé : par exemple, une séparation des états de spin résultant d'un gradient de température créé en comprimant soudainement le piège.

Une des conclusions de notre travail sur les ondes de spin observées dans l'expérience du JILA [2] a été que les équations hydrodynamiques ne sont pas toujours suffisantes et qu'il est dans certains cas nécessaire de recourir à une équation cinétique. Cependant, nous avons ensuite montré, sur l'exemple du gaz de Bose unidimensionnel, l'utilité des équations hydrodynamiques lorsque le système n'est pas faiblement interagissant et qu'il est très difficile d'écrire une équation de transport microscopique. Un prolongement de ce travail sur les modes hydrodynamiques serait d'utiliser la méthode de Combescot et Leyronas "à l'envers" pour obtenir, à partir de mesures expérimentales des modes, des informations sur l'équation d'état de systèmes pour lesquels les théories microscopiques sont pour l'instant impuissantes.

Dans la deuxième partie de ce manuscrit, consacrée aux propriétés d'équilibre, nous avons présenté une extension de la méthode des opérateurs d'Ursell aux systèmes denses. Cette méthode permet en principe d'obtenir les coefficients du Viriel de l'équation d'état d'un gaz dense au-dessus de la transition superfluide. Un prolongement naturel serait de généraliser cette théorie en présence d'un condensat, i.e. sous la transition superfluide. Pour cela, une possibilité serait de se baser sur la méthode des "x-ensembles" de Lee et Yang [148]. Une autre approche consisterait à généraliser sous la transition superfluide la méthode récemment proposée par Martin et Piasecki [149].

Comme nous l'avons déjà mentionné, il serait également intéressant d'utiliser la méthode des opérateurs d'Ursell d'un système dense pour proposer un modèle semi-phénoménologique de l' ^4He . Ce modèle présenterait les deux transitions de phase – gaz-liquide et superfluide – et serait obtenu à partir de considérations générales sur les agrégats dominants : les opérateurs d'Ursell d'un grand nombre de particules sont responsables de la transition gaz-liquide et les grands cycles d'échange de la condensation de Bose-Einstein ou transition superfluide.

Publications

Annexe A

Ursell operators in statistical physics of dense systems : the role of high order operators and exchange cycles

Réf. [26]. Publié dans Eur. Phys. J. B **25**, 463 (2002).

Ursell operators in statistical physics of dense systems: the role of high order operators and of exchange cycles

J.N. Fuchs^a, M. Holzmann^{b,c} and F. Laloë^d

Laboratoire Kastler Brossel, Département de Physique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

Received: date / Revised version: date

Abstract. The purpose of this article is to discuss cluster expansions in dense quantum systems, as well as their interconnection with exchange cycles. We show in general how the Ursell operators of order $l \geq 3$ contribute to an exponential which corresponds to a mean-field energy involving the second operator U_2 , instead of the potential itself as usual - in other words, the mean-field correction is expressed in terms of a modification of a local Boltzmann equilibrium. In a first part, we consider classical statistical mechanics and recall the relation between the reducible part of the classical cluster integrals and the mean-field; we introduce an alternative method to obtain the linear density contribution to the mean-field, which is based on the notion of tree-diagrams and provides a preview of the subsequent quantum calculations. We then proceed to study quantum particles with Boltzmann statistics (distinguishable particles) and show that each Ursell operator U_n with $n \geq 3$ contains a “tree-reducible part”, which groups naturally with U_2 through a linear chain of binary interactions; this part contributes to the associated mean-field experienced by particles in the fluid. The irreducible part, on the other hand, corresponds to the effects associated with three (or more) particles interacting all together at the same time. We then show that the same algebra holds in the case of Fermi or Bose particles, and discuss physically the role of the exchange cycles, combined with interactions. Bose condensed systems are not considered at this stage. The similarities and differences between Boltzmann and quantum statistics are illustrated by this approach, in contrast with field theoretical or Green's functions methods, which do not allow a separate study of the role of quantum statistics and dynamics.

PACS. 05.30.-d Quantum statistical mechanics – 05.20.Jj Statistical mechanics of classical fluids

1 Introduction

A widely used formalism in quantum statistical physics is the formalism of Green's functions [1][2][3], where the techniques of second quantization and field theory are used from the beginning; the notion of exchange operators of indistinguishable particles is of course contained, but in a completely implicit way. In the formalism of Ursell operators [4][5][6], the starting point is first quantization with numbered particles, so that the role of exchange cycles becomes completely explicit: these cycles appear clearly in all diagrams and, for instance, they are the only source of diagrams for the ideal quantum gas. This reduces the distance between the formalism and, for instance, numerical calculations such as the PIMC method (Path Integral Monte Carlo), where particles are also numbered and the

exchange cycles are explicitly sampled by random choices. Moreover, it becomes possible to assume that the particles obey Boltzmann statistics, just by “switching off the cycles”, a task that would be difficult in the Green's function formalism. Needless to say, this does not mean that Green's functions are, in general, less powerful than the Ursell formalism! The opposite is actually closer to reality: for instance, Green's functions handle time-dependent problems easily, while this is not the case in the Ursell formalism. But it remains true that, if one is interested in a detailed discussion of the effects of quantum statistics at equilibrium, it becomes more straightforward to resort to the Ursell formalism.

In this article, we consider dense systems, for which it is not necessarily possible to limit oneself to first order density effects. In contrast to the situation in a dilute gas, a given particle may interact frequently with several others at the same time, and even liquefaction may take place. Therefore, we will no longer ignore all Ursell operators beyond U_2 , as was done in most of previous work in this formalism; operators U_3 , U_4 , etc. now become important. One may actually wonder what the role of these higher order operators is in general, and why exactly it

^a email: jean-noel.fuchs@lkb.ens.fr

^b *Present address:* Physics Department, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1110 W. Green St., Urbana, IL 61801, USA

^c email: holzmann@mail.physics.uiuc.edu

^d email: franck.laloe@lkb.ens.fr

is possible to ignore their role in a dilute system, as was done in [6] for instance. We will see that part of their contribution (what we will call their tree reducible part) groups naturally with U_2 through a chain of binary interactions, and builds an exponential of the mean-field energy. In other words, instead of making the problem more complicated, this contribution of the higher order operators builds exactly the exponential of U_2 that is needed to reconstruct a simple and natural expression of the mean-field. Nevertheless, this mean-field is expressed in terms of the matrix elements of U_2 , instead of the usual matrix elements of the potential itself; in a sense, what we obtain is the exponential of an exponential, since U_2 itself contains exponentials of the Hamiltonian and corresponds physically to the local change of the Boltzmann equilibrium. As a consequence, the logarithms that appeared in [6], and had to be expanded to first order in density, are actually spurious - in other words, this first order expansion was actually unnecessary. In addition, the rest of the contribution of the higher order Ursell operators, the irreducible part, vanishes unless three particles (or more) are all close together, and is really characteristic of many-body collisions and of dense systems.

2 Classical statistical physics

In this part, we quickly review the classical cluster expansion for the parametric equation of state of a fluid; we first recall the results of classical statistical mechanics as a point of comparison.

2.1 General formalism

The general expression of the equation of state was derived by Mayer [7] and Ursell [8]; see also the books by Uhlenbeck and Ford [9] and Hansen and McDonald [10]. A classical system of massive particles, with mass m , is supposed to be contained in a box of finite volume $\mathcal{V}$, with periodic boundary conditions (translationally invariant system); their Hamiltonian is the sum of the kinetic energies plus the interaction energy, which is the sum over all pairs of particles of the interparticle pair potential $V_{ij} = V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$. An useful function in the calculation is the Mayer function f_{ij} defined by:

$$f_{ij} \equiv \exp(-\beta V_{ij}) - 1 \quad (1)$$

This function is everywhere bounded and goes to almost zero when the distance between particles i and j is much larger than the range of the pair potential; it is the classical equivalent of a second Ursell operator $\bar{U}_2(i, j)$ [6].

The classical cluster expansion is the expansion, in the grand canonical ensemble, of the pressure p and of the density ρ of the gas in series of the fugacity $z = e^{\beta\mu}$, where μ is the chemical potential and $\beta = 1/k_B T$ is the inverse temperature. If λ is the de Broglie thermal wavelength,

the expansion can be written as:

$$\beta p = \frac{\ln Z_{gc}}{\mathcal{V}} = \sum_{l=1}^{\infty} b_l(T, \mathcal{V}) \left(\frac{z}{\lambda^3} \right)^l \quad (2)$$

with:

$$\rho = \frac{\langle N \rangle}{\mathcal{V}} = z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\ln Z_{gc}}{\mathcal{V}} \right) = \sum_{l=1}^{\infty} l b_l(T, \mathcal{V}) \left(\frac{z}{\lambda^3} \right)^l \quad (3)$$

where $Z_{gc}(\beta, \mathcal{V}, z)$ is the grand canonical partition function; the definition of the cluster integrals $b_l(T, \mathcal{V})$ is the same as that in the book of Mayer and Mayer [7]. The first coefficients are given by:

$$b_1(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{1! \mathcal{V}} \int d^3 r_1 = 1 \quad (4)$$

$$b_2(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{2! \mathcal{V}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 f_{12} = \frac{1}{2!} \int d^3 r_{12} f(r_{12}) \quad (5)$$

$$b_3(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{3! \mathcal{V}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 [f_{12} f_{13} + f_{12} f_{23} + f_{13} f_{23} + f_{12} f_{13} f_{23}] \quad (6)$$

and so on for $l \geq 4$; these definitions include a $1/\mathcal{V}$ factor so that $b_l(T, \mathcal{V})$ remains intensive when the volume tends to infinity.

It is useful to introduce diagrams to represent the integrals. A l -particle cluster diagram is made of l numbered circles, representing the particles, between which one draws any number of lines (also called links, and representing the f_{ij} 's), each line joining distinct pairs of circles. The diagram is said to be connected when one can go from any particle to any other particle in the cluster following the lines. The general definition of the cluster integrals is then:

$$b_l(T, \mathcal{V}) \equiv \frac{1}{l! \mathcal{V}} \times \text{sum over all possible } l\text{-particle clusters} \quad (7)$$

For example:

$$b_1(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{1! \mathcal{V}} (\bullet) = 1 \quad (8)$$

$$b_2(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{2! \mathcal{V}} (\bullet \text{---} \bullet) \quad (9)$$

and:

$$b_3(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{3! \mathcal{V}} \left(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagup \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagdown \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} \right) \quad (10)$$

2.2 Irreducible diagrams, energy shift and the equation of state

It turns out that, defined in this way, diagrams carry redundant information: as soon as $l \geq 3$, most of the diagrams contributing to b_l can be constructed as products of smaller diagrams (already contained in $b_{l'}$ with $l' < l$). For instance, this is the case of all diagrams in the right hand side of (10), except the last. It then becomes convenient to define the notion of irreducibility: an irreducible cluster is such that, if any line (which is essentially a b_2) is removed from it, it never splits into disconnected clusters; conversely, in a reducible cluster, it is possible to find at least one line that, when cut, will decompose the result into two separate clusters (since each line is essentially a b_2 , reducibility and irreducibility are defined here in terms of binary coefficients b_2 's, but more general definitions are conceivable).

Irreducible diagrams play a special role if one introduces an exponentiation of the fugacity expansion of the density (3). Let us define an energy shift Δ , which shifts all energy levels e_k , by the relation:

$$\rho = e^{-\beta(\Delta - \mu)} \frac{1}{\lambda^3} \quad (11)$$

It can then be shown (see [11], [12], [13], [14]) that Δ is given by the series:

$$-\beta\Delta = \sum_{l=1}^{\infty} \beta_l(T, \mathcal{V}) \rho^l \quad (12)$$

where the new coefficients β_l are defined by:

$$\beta_{l-1}(T, \mathcal{V}) \equiv \frac{1}{(l-1)!\mathcal{V}} \times \text{sum over all irreducible } l\text{-particle clusters} \quad (13)$$

or, equivalently:

$$\beta_{l-1}(T, \mathcal{V}) \equiv l \times \text{Irreducible part of } b_l(T, \mathcal{V}) \quad (14)$$

For example:

$$\beta_1(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{\mathcal{V}} (\bullet \text{---} \bullet) = \int d^3r_{12} f(r_{12}) \quad (15)$$

and:

$$\beta_2(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{2!\mathcal{V}} \left(\triangle \right) \quad (16)$$

One can also show that irreducible clusters are directly related to the equation of state (at finite volume), from which the variable z has been eliminated:

$$\frac{\beta p}{\rho} = 1 - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{l}{l+1} \beta_l(T, \mathcal{V}) \rho^l \quad (17)$$

The proof of this result is given in the book by Mayer and Mayer [7]. Another method of calculation was introduced by Van Kampen [15], with the canonical ensemble instead

of grand canonical; see also [16]. In these calculations, the thermodynamical limit is taken before the l summation while, here, we do not take this limit; the reason is that, as discussed by Lee and Yang [17], taking directly the limit for each coefficient reduces the validity of the calculation to the gaseous phase only.

2.3 Tree-reducible diagrams; mean-field

Let us now suppose that, among all clusters contributing to b_l , we keep only those having l particles and $l-1$ links. They correspond to the minimally connected diagrams: if any link is removed, these diagrams split into two different diagrams. They are, not only obviously reducible (as soon as $l \geq 3$), but also “fully reducible”, since the removal of any line splits the diagram into disconnected clusters. For instance, the fully reducible part of b_3 is:

$$b_3^R(T) = \frac{1}{3!\mathcal{V}} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 [f_{12}f_{13} + f_{12}f_{23} + f_{13}f_{23}] \quad (18)$$

from which the last term that appear on the right hand side of (6) has been eliminated. Graphically, we will represent these clusters by diagrams that have the structure of a tree, such as that of figure 1, and for this reason we shall call them “tree-reducible diagrams”.

In order to construct this tree-diagram, we have to choose one numbered particle as the “root particle”, for instance particle 1. Then, among all particles j that are connected to particle 1 by a link f_{1j} , we select that with the smallest value of j ; let us call k this particle. The same operation is then made again from particle k : one identifies the particle m to which it is related which has the smallest numbering, and puts this particle as the next in the branch; the same operation goes on until one reaches the end of the first branch, which is drawn vertically by convention. One then goes back along this branch towards the origin and identifies the first particle which is connected to another particle outside of the branch; this particle is a branching point, the source of another branch, which is built in exactly the same way, and drawn directly on the right of the first branch. The same process continues and one adds successive branches, which are drawn in a clockwise order from their source; it stops when all particles are included in the tree. This construction provides a well defined geometry for the tree-diagram but, clearly, different tree-diagrams may have the same numerical value¹. It is nevertheless convenient for our reasoning below to classify their contributions according to the various structures of trees.

For instance, the reducible part of b_3 then becomes:

$$b_3^R(T, \mathcal{V}) = \frac{1}{3!} (2 \times \text{---} \bullet + \text{---} \bullet \text{---} \bullet) \quad (19)$$

¹ In fact, the value of these diagrams depends only on the total number of nodes (i.e. particles) l (see Appendix I).

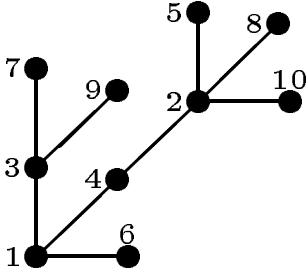


Fig. 1. A tree-diagram corresponding to a 10-particle cluster; the tree symbolizes one of the terms that are contained in the tree-reducible part of b_{10} . The construction method that is used to build the branches from the structure of the integral is explained in the text.

(from now on, we assume that the factor $1/\mathcal{V}$ is included in the value of the tree-diagram, in order to simplify the notation).

Let us now consider a given tree-diagram and evaluate its weight; the question is to determine how many different numberings are compatible with the rules that we have used to build it. Suppose then that we put random numbers into the $l - 1$ nodes that are available in the tree. The result will be acceptable only if a correct clockwise ordering of the particle numbers is obtained at each bifurcation node. Let us call $r_1, r_2, \dots$ the branching factors (or ramification factors) of the nodes, i.e. the number of secondary branches at each node; a linear diagram has only $r = 1$, a diagram with one binary bifurcation has one $r = 2$, and r takes the values 3, 4, etc. when more branches start from the same source. Each node will then introduce a probability $1/r_i!$ for this correct ordering to be obtained. Since there are $(l - 1)!$ ways of distributing the $l - 1$ particles among the nodes, the final result is that the weight of the tree-diagram is:

$$\frac{(l - 1)!}{\prod_i r_i!} \quad (20)$$

If we call T_{diag} the value of a tree-diagram (including the $1/\mathcal{V}$ factor), we can then express the tree-reducible l particles cluster as:

$$l! b_l^R(T) = \sum_{\{tree\ diagrams\}} \frac{(l - 1)!}{\prod_i r_i!} T_{diag}. \quad (21)$$

Inserting this expression into the z -expansion of the density (3), we notice that various simplifications take place

in the coefficients, so that we obtain:

$$\rho = \frac{z}{\lambda^3} \left\{ 1 + \frac{z/\lambda^3}{1!} \times \text{diagram} + \frac{(z/\lambda^3)^2}{2!} \left(\frac{2!}{2!} \times \text{diagram} + \frac{2!}{1!} \times \text{diagram} \right) + \dots + \frac{(z/\lambda^3)^{l-1}}{(l-1)!} \times \frac{(l-1)!}{\prod_i r_i!} \times \text{diagram} + \dots \right\} \quad (22)$$

It is now possible to regroup diagrams according to the value of the branching factor r_1 at their root:

$$\rho = \frac{z}{\lambda^3} \left\{ 1 + \frac{1}{1!} \left[\frac{z}{\lambda^3} \times \text{diagram} + \left(\frac{z}{\lambda^3} \right)^2 \times \text{diagram} + \left(\frac{z}{\lambda^3} \right)^3 \times \text{diagram} + \dots \right] + \frac{1}{2!} \left[\left(\frac{z}{\lambda^3} \right)^2 \times \text{diagram} + \dots \right] + \dots \right\} \quad (23)$$

One then notices a sort of self-similarity property of the expansion: at each secondary nodes, one gets an expansion that provides again all the terms that are contained in ρ . Therefore:

$$\rho = \frac{z}{\lambda^3} \left\{ 1 + \frac{1}{2!} \times \text{diagram} + \dots + \frac{1}{r_1!} \times \text{diagram} + \dots \right\} \quad (24)$$

We now recognize the development of an exponential:

$$\rho = \frac{z}{\lambda^3} \left\{ 1 + \beta_1 \rho + \frac{1}{2!} \times [\beta_1 \rho]^2 + \dots + \frac{1}{r_1!} \times [\beta_1 \rho]^{r_1} + \dots \right\}$$

where $\beta_1 = 2b_2$ is defined in (15), and finally obtain the very simple result:

$$\rho = \frac{z}{\lambda^3} \exp(\beta_1 \rho) \quad (25)$$

or:

$$-\beta \Delta = \beta_1 \rho \quad (26)$$

Therefore, when only tree-reducible diagrams are taken into account, the energy shift becomes exactly proportional to the density; we recover what is usually called

the mean-field approximation. The method we have used is different from the method of refs. [11][12][13][14]; it relies on the branching properties of tree-reducible diagrams and not on the use of complex variables. Moreover, as we will see below, the method can be transposed to quantum mechanics.

Of course, equation (26) can also be obtained by the same method as these references, in a particular case: one assumes that the only non-zero irreducible cluster integral is β_1 . Clearly, in this situation, all cluster integrals reduce to their tree-reducible value b_l^R , which can be expressed as a product of terms $b_2 = \beta_1/2$ (see Appendix I):

$$b_l^R \equiv \frac{1}{l!} N_l \beta_1^{l-1} \quad (27)$$

where N_l is the number of clusters with l numbered particles and $l - 1$ links, i.e. the number of classical tree-diagrams containing l particles:

$$N_l = \sum_{\{\text{tree diagrams}\}} \frac{(l-1)!}{\Pi_i(r_i)!} \quad (28)$$

If we insert the corresponding value of b_l into equations (2) and (3), we obtain again equation (26). Moreover, equation (17) then becomes:

$$\frac{\beta p}{\rho} = 1 - \frac{1}{2} \beta_1(T, \mathcal{V}) \rho = 1 - b_2(T, \mathcal{V}) \rho \quad (29)$$

which contains only a linear density correction.

3 Quantum statistical physics: Boltzmann statistics

We now leave classical statistical mechanics and reason within quantum mechanics; in a first step, we consider distinguishable particles (Boltzmann particles), postponing the discussion of the effects of quantum statistics to the next section (bosons or fermions). We first introduce our notation and then discuss the introduction of exponentials from the structure of tree diagrams.

3.1 Notation

We assume that the Hamiltonian of the system of N non-relativistic particles is:

$$H = \sum_{i=1}^N H_0(i) + \sum_{i<j} V_{ij} \quad (30)$$

where $H_0(i)$ is the one-particle energy (sum of its kinetic energy plus coupling to an external potential) and where the binary interaction potential V_{ij} is a function of the distance between particles i and j :

$$V_{ij} = V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = V(r_{ij}) \quad (31)$$

As in [4], we define the Ursell operators:

$$U_1(1) = \exp[-\beta H_0(1)] \quad (32)$$

and:

$$U_2(1, 2) = \exp[-\beta [H_0(1) + H_0(2) + V_{12}]] - U_1(1)U_1(2) \quad (33)$$

and so on for higher order Ursell operators $U_3(1, 2, 3)$, $U_4(1, 2, 3, 4)$, etc. All the U_l 's for $l \geq 2$ have a clustering property; for instance, the diagonal matrix elements of $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | U_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle$ tend towards zero when the distance $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ becomes larger than some microscopic distance; in other words, the matrix elements of the same operator in the momentum representation are proportional to the inverse volume $1/\mathcal{V}$. One can then express the canonical partition function Z_N as a sum of products of traces of operators U_l 's, each corresponding to a given diagram. Here, since we are dealing with Boltzmann particles, the number of diagrams is smaller than in [4]; exchange cycles do not occur, which is equivalent to limit them to cycles containing one particle only - in other words we exclude all those diagrams that contain horizontal lines². Going to the grand canonical ensemble, one can then show that the logarithm of the corresponding partition function $Z_{g.c.}$ is given by the following sum of traces:

$$\ln Z_{g.c.} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l!} \text{Tr}_{1,2,\dots,l} \{U_l(1, 2, \dots, l)\} \quad (34)$$

where the factor $1/l!$ corresponds to the weight of the diagram, which arises because there are $l!$ equivalent ways to distribute l numbered particles inside the Ursell operator, as discussed in [4].

Rather than studying a thermodynamic potential, it is often more convenient to focus the discussion on the single particle density operator $\rho_I(1)$, as in ref. [6]. One then gets:

$$\begin{aligned} \rho_I(1) &= zU_1(1) + z^2 \text{Tr}_2 \{U_2(1, 2)\} \\ &+ \frac{z^3}{2!} \text{Tr}_{2,3} \{U_3(1, 2, 3)\} + \dots \end{aligned} \quad (35)$$

Now, because particle 1 is "tagged", it plays a special role, so that the generic term of this series is:

$$\frac{z^l}{(l-1)!} \text{Tr}_{2,3,\dots,l} \{U_l(1, 2, 3, \dots, l)\} \quad (36)$$

with a weight $1/(l-1)!$ corresponding to the equivalent distributions of all the untagged particles. In the usual graphical representation or Ursell diagrams [4][6], where vertical lines symbolize U_l operators (for $l \geq 2$) and horizontal lines exchange cycles (we have already mentioned

² As usual, we retain the overall $1/N!$ factor in the symmetrizer, in order to avoid some well-known difficulties of classical statistical mechanics (Gibbs paradox, etc.).

that, since here we are dealing with distinguishable particles, no cycle of length greater than one occurs), equation (35) becomes:

$$\rho_I(1) = \text{---} + \text{---} + \frac{1}{2!} \times \text{---} + \dots \quad (37)$$

At this stage, it is convenient [6][18] to express the second rank operators U_2 in terms of the operator $\bar{U}_2$ defined by:

$$U_2(1, 2) = \sqrt{U_1(1)U_1(2)} \bar{U}_2(1, 2) \sqrt{U_1(1)U_1(2)} \quad (38)$$

(for the moment, when $l > 2$, we do not specify the exact relation between an U_l operator and $\bar{U}_l$, but we will come back to this point later). We note that, here, $\bar{U}_2$ is defined symmetrically, with square roots of U_1 operators on each side (U_1 is a positive operator), so that $\bar{U}_2$ is Hermitian - this was not the case in [19]. The introduction of $\bar{U}_2$ has two advantages. First, factorizing the kinetic energy brings the formalism closer to classical statistical mechanics, where kinetic energy always factorizes out exactly; in other words, $\bar{U}_2(i, j)$ is the quantum equivalent of f_{ij} , although it is not strictly analogous (in quantum mechanics operators do not necessarily commute, so that the kinetic energy can still play a role in $\bar{U}_2(i, j)$). Second, in the limit of low energies, it is possible to make use of the MIME (momentum independent matrix elements) approximation, where the diagonal matrix elements of $\bar{U}_2$ are constants - see for instance the characterization of the diagonal elements of $\bar{U}_2$ in terms of the Ursell length in [19]. Graphically, in order to distinguish U_2 's from $\bar{U}_2$'s in diagrams, we use two vertical parallel lines in the former case, as in [4] and [5], but only a single line for $\bar{U}_2$'s.

3.2 Tree-reducible part of $\bar{U}_l$ and U_l

For any value of l , we now define the tree-reducible operator (or fully reducible operator) $\bar{U}_l^R$ by analogy with the tree-reducible part of a classical cluster b_l . Since the classical links correspond to $\bar{U}_2$ operators in quantum mechanics, and since the minimal number of links is $l - 1$, we will express the fully reducible operator $\bar{U}_l$ as a product of $l - 1$ operators $\bar{U}_2$; in addition, we also have to take into account the fact that operators do not necessarily commute with each other and apply an appropriate symmetrization. We will therefore define $\bar{U}_l^R$ by a double sum:

$$\bar{U}_l^R(1, 2, \dots, l) = \sum_{\{\bar{U}_2\}} \frac{1}{(l-1)!} \times \sum_{\{\text{op. orderings}\}} \bar{U}_2(\cdot, \cdot) \bar{U}_2(\cdot, \cdot) \dots \bar{U}_2(\cdot, \cdot) \quad (39)$$

The first sum symbolizes all different ways to choose sets of $l - 1$ operators $\bar{U}_2$ so that the product correspond to a minimally connected cluster - in other words, in all classical tree-diagrams, we replace each f_{ij} by the corresponding $\bar{U}_2(i, j)$. The second sum, together with the factor $1/(l - 1)!$, corresponds to an average of the product of all

operators over all possible orderings of these $l - 1$ operators. With this definition, $\bar{U}_l^R$ is obviously Hermitian as well as symmetrical with respect to all particles $1, 2, \dots, l$. For instance:

$$\begin{aligned} \bar{U}_3^R(1, 2, 3) = & \frac{1}{2!} [\bar{U}_2(1, 2) \bar{U}_2(1, 3) + \bar{U}_2(1, 3) \bar{U}_2(1, 2)] \\ & + \frac{1}{2!} [\bar{U}_2(1, 2) \bar{U}_2(2, 3) + \bar{U}_2(2, 3) \bar{U}_2(1, 2)] \\ & + \frac{1}{2!} [\bar{U}_2(1, 3) \bar{U}_2(2, 3) + \bar{U}_2(2, 3) \bar{U}_2(1, 3)] \end{aligned} \quad (40)$$

We now wish to define an operator U_l^R that we will call the tree-reducible part of U_l . The first idea that comes to mind is to mimic (38) and to define U_l^R by just multiplying $\bar{U}_l^R$ on both sides by a product of $\sqrt{U_1}$'s. This is possible, but it turns out that this definition would be less convenient than another slightly different possibility, where some square root operators are inserted at different places. To introduce this definition, we first remark that each term in the first summation of (39) can be associated with a tree, exactly as in the classical tree of figure 1, where particle 1 is put at the root, and all the rest of the diagram is built exactly in the same way (the f_{ij} 's are replaced by $\bar{U}_2(i, j)$'s). The problem now is how to properly "dress" this diagram with $\sqrt{U_1}$'s in order to build a proper U_l^R ; we will do this operation progressively, starting from the root. For particle 1, we choose to put $\sqrt{U_1(1)}$ on each side of $\bar{U}_l^R$, as in (38). We then progress along the branches of the tree; we first consider all $\bar{U}_2(1, j)$'s that start from the root, and associate to each of them one $\sqrt{U_1(j)}$ that is inserted directly on the right side of this $\bar{U}_2$ operator; the other $\sqrt{U_1(j)}$ is merely put at the end, after all the $\bar{U}$'s. We then proceed to apply exactly the same method to the "second generation" of $\bar{U}_2(j, k)$'s, and again insert one $\sqrt{U_1(k)}$'s directly on their right side, another at the end, etc.. We continue this operation until the whole tree is dressed with U_1 's; the construction is sketched in figure 2, which shows the association between the additional U_1 's and the initial $\bar{U}_2$'s. Applying this dressing procedure to each term of the right hand side of (39) leads to an operator that we note $\hat{U}_l^R$. For instance, if $l = 3$, we have:

$$\begin{aligned} \hat{U}_3^R(1, 2, 3) = & \frac{1}{2} \sqrt{U_1(1)} \left[\bar{U}_2(1, 2) \sqrt{U_1(2)} \bar{U}_2(1, 3) \sqrt{U_1(3)} + \right. \\ & + \bar{U}_2(1, 3) \sqrt{U_1(3)} \bar{U}_2(1, 2) \sqrt{U_1(2)} + \\ & + \bar{U}_2(1, 2) \sqrt{U_1(2)} \bar{U}_2(2, 3) \sqrt{U_1(3)} + \dots \left. \right] \times \\ & \times \sqrt{U_1(1)U_1(2)U_1(3)} \end{aligned} \quad (41)$$

Finally, to make sure that the operator U_l^R is Hermitian, we simply define it as the Hermitian part of $\hat{U}_l^R$:

$$U_l^R(1, 2, \dots, l) = \frac{1}{2} \left[\hat{U}_l^R(1, 2, \dots, l) + \left(\hat{U}_l^R(1, 2, \dots, l) \right)^\dagger \right] \quad (42)$$

(we will nevertheless see that, in practice, this symmetrization has no consequence on the following calculations,

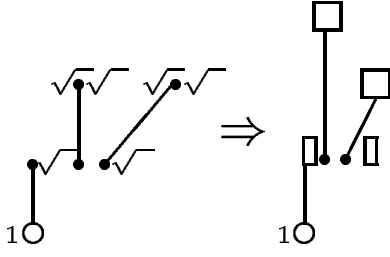


Fig. 2. In this diagram, the single lines symbolize $\bar{U}_2$ operators (as opposed to double lines which symbolize U_2 's in Ursell diagrams). The figure illustrates symbolically how $\sqrt{U_1}$'s (symbolized as squareroots $\sqrt{}$ in the left part, as rectangles in the right part) are inserted into each product of $\bar{U}_2$'s that appears in $\bar{U}_l^R$, in order to build an operator U_l^R .

which deal only with partial traces: the distinction between $\hat{U}_l^R$ and U_l^R is not essential here).

3.3 Partial trace

We now study the following partial trace with respect to particles 2, 3, ..., l :

$$Tr_{2,3,\dots,l} \{U_l^R(1, 2, 3, \dots, l)\} \quad (43)$$

which is still an operator in the space of states of particle 1. Since U_l^R is obtained from (39) by adding $\sqrt{U_1}$'s at appropriate places in each term of the sum, the trace contained in (43) can itself be expressed as a sum of traces of products of operators. To each of these terms, we will now associate another sort of tree diagram, which resembles that of figure 2, but where the order of the branches now characterize the order of operators under the trace (instead of being related to the numbering of the particles).

3.3.1 Normal ordering

The purpose of this section is to put the operators in a standard order that can be described by a tree-diagram corresponding to a well-defined contribution to the value of the partial trace that provides ρ_1 . As before, the open circle at the root of the tree corresponds to particle 1, but now the upper branch corresponds to the first sequence of operators that occur inside the trace, the first sub-branch to the second sequence, etc. This new tree is actually not very different from the initial tree: the only difference is actually the way in which the ordering of its branches is defined.

Let us first consider a given term contained in the right hand side of (39), and suppose that we are interested in its partial trace - for the moment we leave aside the $\sqrt{U_1}$'s, and define the notion of "normal ordering" for the partial trace of any term that appear in the sum defining $\bar{U}_l(1, 2, \dots, l)$. To reach this normal ordering, the first step

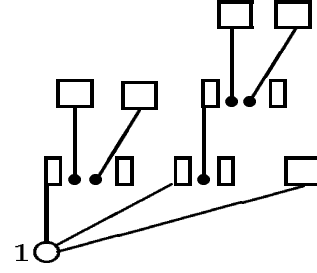


Fig. 3. This figure shows a ρ_1 tree-diagram where the order of the branches now determines the order of operators inside a trace over variables of all particles, except particle number 1; the first vertical branch corresponds to the first group of operators, the first secondary branch on the right to the next group, etc. Moreover, each $\bar{U}_2$ carries with it two $\sqrt{U_1}$ operators; in order to simplify the diagrams, we represent them as half-squares (rectangles). A full square represents a U_1 operator.

is to locate the first operator of the product that contains particle 1, as well as some other particle i , $\bar{U}_2(1, i)$, and to move it to the front (the left side of the product): all operators that occurred before are moved to the end of the series (the right), in the same order, by using the property of circular permutation under the trace. The second step is to locate, among all operators now sitting after this operator, which is the first operator $\bar{U}_2(i, j)$ containing i , and to move it to the second position, directly to the right of $\bar{U}_2(1, i)$; this is possible since, if the intermediate operators do not contain³ particle 1, they can be moved to the left of $\bar{U}_2(1, i)$ and then to the end of the series; if they contain particle 1, they cannot contain⁴ particle j , so that they can be moved just after $\bar{U}_2(i, j)$. The series now begins with the product $\bar{U}_2(1, i)\bar{U}_2(i, j)$. The third step is similar to the second: one locates on the right of $\bar{U}_2(i, j)$ the first operator that contains particle j , $\bar{U}_2(j, k)$, and moves it directly to the third rank, by the same method: if the intermediate operators contain⁵ neither particle 1 nor particle i , nor particle j , they are moved to the front and then to the end; if they contain one of them, they do not contain⁶ particle k , they are moved just after $\bar{U}_2(j, k)$. The series now begins with the product $\bar{U}_2(1, i)\bar{U}_2(i, j)\bar{U}_2(j, k)$. The same process continues by iteration until, at some point, one reaches the end of the branch of the tree, with a numbered particle that does not occur any other $\bar{U}_2$.

³ They cannot contain particle i by assumption.

⁴ They cannot contain both particles 1 and j , since otherwise the two particles would be linked twice, which is contradictory with the tree structure of figure 2.

⁵ They cannot contain particle j by assumption.

⁶ The intermediate operators can not contain at the same time particle k and either particle 1, or i or j : for instance, if they contained k and i , those two particles would be linked twice (directly and through particle j), which is contradictory with the structure of the tree-diagram.

One then proceeds to construct a new branch, and therefore to select a ramification point. For this purpose, one goes backwards from the end along the first branch, locates the first numbered particle m , in operator $\bar{U}_2(m, p)$, that occurs (at least) a second time in the list of remaining operators, in $\bar{U}_2(m, n)$; this latter operator is then moved directly to the right of $\bar{U}_2(m, p)$, and creates the starting point of another branch. The new branch is then extended by the same method as the first. When this branch is also finished, two cases may occur: either particle m occurs a third time (or more), so that three branches (or more) of the tree will originate from the same point; or particle m does not occur anymore, and one continues to move backwards in the main branch to find another particle that occurs again in one of the non-ordered $\bar{U}_2$'s. At some point, all operators have been moved to their appropriate place, and the process stops.

Now, to get the contribution to the trace, we have to add $\sqrt{U_1}$'s at the appropriate places, but this does not change much to the reasoning that we have made for reaching the normal ordering of the operators: the $\sqrt{U_1}$'s at the end of the product do not move during the operation, while those that directly follow $\bar{U}_2$'s move together with this operator (this is possible since they do not change the commutations rules). Consequently, all operators can be put into their normal ordering exactly in the same way, as for $\bar{U}_2$'s only.

Obviously, the numbering of all particles, except particle 1, is totally irrelevant for the value of the trace, since it defines dummy variables; what is important is the geometry of the tree, since it determines the value of the operator obtained after the partial trace is taken⁷. Therefore, a diagram such as that of figure 3 corresponds to a well-defined contribution to the trace. Another remark is that the contribution of $\hat{U}_l^R$ to the trace already provides an Hermitian operator acting on particle 1: by circular permutation under the traces, it is easy to see that the only change induced by a reversing of the order of the operators leads to a tree where the order of the branches is reversed, in other words to a tree that already exists in $\hat{U}_l^R$ and ensures Hermiticity of the partial trace. This means that the Hermitian symmetrization of (42) is actually not necessary; from now on, we will therefore only consider the trace of $\hat{U}_l^R$.

3.3.2 Weights of tree-diagrams

From the results of the preceding section, we can express the partial trace of $\hat{U}_l^R$ as a sum over all diagrams such as that of figure 3; we now wish to know what their weight is, or in other words, how many terms of the double sum (39) correspond to each diagram. The reasoning is analogous to the reasoning of § 2.3, except that now we are dealing with order of operators, instead of particle numberings. Suppose that we ascribe arbitrary particle numbers to all nodes of this diagram - since particle 1 is always at the

root of the diagram, this can be done in $(l-1)!$ different ways. To each of these numberings corresponds a given sequence of $\bar{U}_2$ operators, and therefore a given term of the first summation of (39). Now, how many terms of the second summation then correspond to this given diagram? To answer this question depends on the branching (or ramification) factors r_1, r_2 , etc. defined in § 2.3. In the list of $\bar{U}_2$'s, the only non-commuting operators are those which contain one common particle⁸. Starting from any order of operators, and after ordering them according to the procedure of § 3.3.1, it is easy to see that there is a probability $1/(r_1)!$ that the first ramification will take place with the appropriate order of chain of operators, a probability $1/(r_1)!(r_2)!$ that the right order is still obtained after two ramifications, etc.. Finally, among all operators that are contained in the second sum of (39), the number of terms that correspond to each tree-diagram is:

$$\frac{(l-1)!}{\prod_i (r_i)!} \quad (44)$$

If we take into account the factor $(l-1)!$ mentioned before (corresponding to the first summation) as well as the factor $1/(l-1)!$ which is explicit in (39), we obtain the following weight of the tree-diagram:

$$(l-1)! \frac{1}{(l-1)!} \frac{(l-1)!}{\prod_i (r_i)!} = \frac{(l-1)!}{\prod_i (r_i)!} \quad (45)$$

so that we eventually obtain:

$$Tr_{2,3,\dots,l} \{U_l^R(1, 2, 3, \dots, l)\} = \sum_{\{\rho_1 \text{ diagrams}\}} \frac{(l-1)!}{\prod_i (r_i)!} T_{diag.}(1) \quad (46)$$

where $T_{diag.}(1)$ is the operator (acting on the variables of particle 1) that is obtained by the partial trace corresponding to the diagram with branching factors r_1, r_2 , etc.

3.4 Energy shift for ρ_I

The next step is to obtain the one-particle density from the previous considerations. Its expression in terms of Ursell operators [5] (only retaining their tree-reducible part) is:

$$\begin{aligned} \rho_I(1) = & zU_1(1) + z^2 Tr_2 \{U_2^R(1, 2)\} \\ & + \frac{z^3}{2!} Tr_{2,3} \{U_3^R(1, 2, 3)\} + \dots \\ & + \frac{z^{l-1}}{(l-1)!} Tr_{2,\dots,l} \{U_l^R(1, \dots, l)\} + \dots \end{aligned} \quad (47)$$

Replacing the reduced Ursell operators by their expression as sums of tree-diagrams and taking the counting factors

⁷ But different trees do not necessarily correspond to different results.

⁸ They never contain two, otherwise the diagram would not be minimally connected.

into account (45), we see that ρ_I becomes:

$$\begin{aligned} \rho_I(1) = & \sqrt{zU_1(1)} \left\{ 1 + \frac{z}{1!} \times \text{[diagram: circle with one square above]} + \right. \\ & + \frac{z^2}{2!} \left(\frac{2!}{2!} \times \text{[diagram: circle with two squares above]} + \frac{2!}{1!} \times \text{[diagram: circle with one square above and one square to the right]} \right) \\ & + \dots + \frac{z^{l-1}}{(l-1)!} \times \frac{(l-1)!}{\Pi_i(r_i)!} \times \text{[diagram: circle with l-1 squares branching out]} + \dots \Bigg\} \times \\ & \times \sqrt{zU_1(1)} \end{aligned} \quad (48)$$

It is now possible to regroup diagrams according to the “first branching factor” $1/(r_1)!$, and to write:

$$\begin{aligned} \rho_I(1) = & \sqrt{zU_1(1)} \left\{ 1 + \right. \\ & + \frac{1}{1!} \left(z \times \text{[diagram: circle with one square above]} + z^2 \times \text{[diagram: circle with two squares above]} + \frac{1}{2!} z^3 \times \text{[diagram: circle with three squares above]} + \dots \right) \\ & + \frac{1}{2!} \left(z^2 \times \text{[diagram: circle with one square above and one square to the right]} + \dots \right) + \dots \Bigg\} \sqrt{zU_1(1)} \end{aligned} \quad (49)$$

Again, we notice a self-similarity property of the expansion, which makes one-particle density operators appear on the right hand side of the equation:

$$\begin{aligned} \rho_I(1) = & \sqrt{zU_1(1)} \left\{ 1 + \text{[diagram: circle with one square above]} + \frac{1}{2!} \times \text{[diagram: circle with one square above and one square to the right]} + \dots + \right. \\ & + \frac{1}{r_1!} \times \text{[diagram: circle with one square above and one square to the right]} + \dots \Bigg\} \sqrt{zU_1(1)} \end{aligned} \quad (50)$$

We now recognize the development of an exponential operator, and finally obtain:

$$\rho_I(1) = \sqrt{zU_1(1)} \exp \left(Tr_2 \{ \bar{U}_2(1, 2) \rho_I(2) \} \right) \sqrt{zU_1(1)} \quad (51)$$

or:

$$-\beta \Delta(1) = Tr_2 \{ \bar{U}_2(1, 2) \rho_I(2) \} \quad (52)$$

We therefore find that the energy shift depends linearly on the one-particle density operator (proportional to the density), which corresponds exactly to the mean-field approximation.

3.5 Physical discussion

The preceding calculation illustrates the physics that is behind the construction of a mean-field: when the test particle 1 interacts with another particle i , it is also possible that this particle interacts in turn with particle j , and so on. Moreover, either the test particle or any other particle may perfectly well interact with several others; this introduces branching in the interaction tree, either directly at the root or at any other place. What is not possible is to create “loops”: any particle can interact with one or several neighbors, and these interactions can propagate further to other particles through many intermediate carriers, but they should never come back to the original particle. This is very similar to the “no re-collision” assumption which is behind the “molecular chaos Ansatz” of the Boltzmann transport equation.

We note that the expression (52) involves the operator $\bar{U}_2(1, 2)$, instead of the potential itself V_{12} as in the usual expressions of the mean-field. In other words, the mean-field involves matrix elements of an exponential containing the interaction potential (see definition (33) of the second Ursell operator), more precisely the difference between two exponentials (corresponding to a change of the local Boltzmann equilibrium), instead of not merely the matrix elements of V_{12} itself. Of course, if this potential can be treated to first order, this makes no difference, as shown by an elementary calculation. But realistic inter-atomic potentials can not be treated properly by first order perturbation theory (Born approximation), and this exponential may actually introduce an enormous difference. A well-known illustration of this fact is given by alkali atoms, which have a strongly attractive potential sustaining many bound states (V_{12} is negative, except in the very short range part of the potential); nevertheless, the phase shift at zero energy may correspond, either to a positive scattering length (effective repulsion), or to a negative value (effective attraction), depending on small details of the potential and on a very delicate balance effect between attraction and repulsion⁹. A naive reasoning in terms of the potential itself could lead to the idea that, in a dilute gas of alkali atoms, the mean-field should always be very attractive. Of course, this is known to be incorrect: the mean-field is actually repulsive when a is positive, and attractive only when a is negative. The usual way to understand this property is to replace the real potential V_{12} by a pseudo-potential, which is directly proportional to the scattering length a and treated to first order, a somewhat heuristic method (since the exact reason why using the real potential is incorrect is not so clear). Here, we clearly see that what appears naturally is the matrix elements of $\bar{U}_2(1, 2)$; as shown in [19], the latter can be expressed in terms of phase shifts and be shown to be proportional to the scattering length¹⁰ a : for instance, if the

⁹ Even a purely attractive potential may have a positive or negative scattering length, depending on the position of the last bound state with respect to the continuum.

¹⁰ More precisely, this is true for the dominant part of the matrix element, which depends on the value of the collision wave

latter is positive, we directly get a positive value for the mean-field, without any special manipulation¹¹.

Another remark is that (51) and (52) give ρ_I as the product of exponentials, and not the exponential of a sum, which is not the same thing if the operators do not commute. For translationally invariant systems, this distinction vanishes since all the single particle operators are diagonal in the same basis (the momentum basis), and therefore commute. In other cases, one should be careful to take into account non-commutativity of operators; for instance, the Hermitian operator Δ can not be seen exactly as a correction to the one-particle Hamiltonian.

Finally, we remark that our reasoning could be generalized. Here, we have expressed all reducible parts of Ursell operators in terms of $\bar{U}_2$, which is its own irreducible part; we have left aside the irreducible part $\bar{U}_3^{Irr.}$ of $\bar{U}_3$. But it should be possible to go further, and to use $\bar{U}_3^{Irr.}$ as the starting point of another decomposition of all $\bar{U}_l$'s for $l \geq 4$; in this way, all these $\bar{U}_l$'s could give a contribution to the energy shift Δ that is quadratic in the density. More details on this calculation are given in Appendix III.

4 Quantum statistical physics: identical particles

The formalism for identical (Bose or Fermi) particles differs from Boltzmann particles by the inclusion of exchange cycles. They introduce horizontal parts in the Ursell operator diagrams [4][5][6], which combine with the vertical lines associated with the Ursell operators; many more diagrams have to be taken into account in order to include quantum statistics. Despite this big difference, we will see that the formalism introduces almost the same mechanism and that the exponential of energy corrections also appear naturally.

functions outside of the interaction potential (asymptotic value of the scattering states). Another contribution arises from the wave functions inside the potential. Nevertheless, if the range of the potential is very small, the latter contribution remains negligible.

¹¹ Of course, other methods to prove the same result also exist; for instance, in the Green's function formalism, the summation of an infinite series of ladder diagrams can be used to construct the scattering length from the potential itself.

4.1 General equations

As shown in reference [5], for identical particles, equation (35) should be replaced by:

$$\rho_I = f_1 + \begin{array}{c} \text{---} \boxed{1+\eta f_1} \text{---} \\ | \\ \boxed{1+\eta f_1} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \boxed{1+\eta f_1} \text{---} \\ | \quad | \\ \boxed{1+\eta f_1} \quad \boxed{1+\eta f_1} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \boxed{1+\eta f_1} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \boxed{1+\eta f_1} \quad \boxed{1+\eta f_1} \quad \boxed{1+\eta f_1} \end{array} + \dots \quad (53)$$

where f_1 is the one-particle density operator for an ideal gas:

$$f_1(1) = \frac{zU_1(1)}{1 - \eta zU_1(1)} \quad (54)$$

with $\eta = +1$ for bosons, $\eta = -1$ for fermions. In (53), the operators $[1 + \eta f_1]$ arise from a summation over all possible values of cycle length l (ranging from $l = 0$ to infinity) of the product $[\eta zU_1(1)]^l$ - the origin of the factor η is that, for fermions, every exchange cycle of length l introduces a $(-1)^l$ sign into the diagram which contains it. Generally speaking, in all such diagrams, the lowest horizontal line corresponds to the multiplication of operators acting in the space of particle 1, while all the other lines above correspond to traced variables of other particles.

In [6], the series giving ρ_I was re-written in a self-consistent way, which resums in one single diagram an infinite number of diagrams of the initial series (53):

$$\rho_I = f_1 + \begin{array}{c} \text{---} \boxed{1+\eta \rho_I} \text{---} \\ | \\ \boxed{1+\eta \rho_I} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \boxed{1+\eta \rho_I} \text{---} \\ | \quad | \\ \boxed{1+\eta \rho_I} \quad \boxed{1+\eta \rho_I} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \boxed{1+\eta \rho_I} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \boxed{1+\eta \rho_I} \quad \boxed{1+\eta \rho_I} \quad \boxed{1+\eta \rho_I} \end{array} + \dots \quad (55)$$

For instance, the diagram of the third line of (53), as well as many other similar diagrams, are now included in the first term after f_1 in (55), which symbolizes the partial trace:

$$2z^2 (1 + \eta f_1(1)) \text{Tr}_2 \{U_2(1,2) [1 + \eta \rho_I(2)]\} (1 + \eta \rho_I(1)) \quad (56)$$

In (55), the second term after f_1 turns out to be the exchange term of (56), since it can be written:

$$2z^2 (1 + \eta f_1(1)) \text{Tr}_2 \{U_2(1,2) \eta P_{ex.}(1,2) [1 + \eta \rho_I(2)]\} \times (1 + \eta \rho_I(1)) \quad (57)$$

where $P_{ex.}$ is the exchange operator between particles 1 and 2. These two terms therefore group naturally together

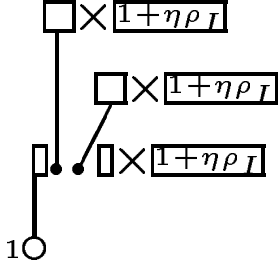


Fig. 4. With quantum statistics, this diagram replaces the diagram in the right part of figure 2; note the presence of the statistical $[1 + \eta\rho_I]$ factors.

with the introduction of the symmetrized (S : $\eta = 1$) or antisymmetrized (A : $\eta = -1$) form of the U_2 operator:

$$U_2^{S,A}(1, 2) = \frac{1 + \eta P_{ex.}(1, 2)}{2} U_2(1, 2) \quad (58)$$

For a *dilute* gas, they were interpreted in [6] as the mean-field correction, which provides no correction to the critical temperature of the gas within the MIME approximation (see §3.1). The explicit expression of the third term is, similarly:

$$2z^2 (1 + \eta f_1(1)) \text{Tr}_2 \{U_2(1, 2) (1 + \eta\rho_I(1)) (1 + \eta\rho_I(2)) \times \\ \times U_2(1, 2) (1 + \eta\rho_I(2)) (1 + \eta\rho_I(1))\} \quad (59)$$

and, as the preceding term, it groups with another diagram (not shown) that appears as its exchange diagram.

4.2 Introducing exponentials

Our purpose now is to introduce exponentials in order to make energy shifts appear explicitly. For the ideal gas, the one particle distribution is given by (54) so that, since $\eta^2 = 1$:

$$1 + \eta (f_1)^{-1} = \eta [zU_1]^{-1} = \eta \exp[\beta (H_1(1) - \mu)] \quad (60)$$

Similarly:

$$\eta [1 + \eta (f_1)^{-1}]^{-1} = \frac{f_1}{1 + \eta f_1} = zU_1 \quad (61)$$

where the same exponential appears, now with a negative exponent. To calculate energy shifts, it is therefore natural to introduce quantities such as $1 + \eta(\rho_I)^{-1}$ or $\rho_I/(1 + \eta\rho_I)$.

To do this, we remark that the lower lines of all diagrams contained in (53) start and end with the same operators, so that equation (55) can be re-written as:

$$\rho_I(1) = f_1(1) + [1 + \eta f_1(1)] K(1) [1 + \eta\rho_I(1)] \quad (62)$$

where the operator K is an infinite sum of partial traces, containing various number of traced U_2 's as well as $[1 + \eta\rho_I]$'s more convenient.

in the horizontal lines:

$$K = \begin{array}{c} \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \\ + \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \\ + \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \\ + \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \boxed{1 + \eta\rho_I} \text{---} \\ + \dots \end{array} \quad (63)$$

In other words, the diagrams corresponding to K are obtained from those corresponding to ρ_I by simply removing the two external parts of the lowest line (diagram amputation). The operator K is clearly Hermitian, as can be shown by using circular permutation of operators under the trace. There is an obvious analogy between operator K and the self-energies in the formalism of Green's functions.

Now, if we multiply both sides of (62) by $(f_1)^{-1}$ on the left, and by $(\rho_I)^{-1}$ on the right, we obtain:

$$(f_1)^{-1} = (\rho_I)^{-1} + \left(1 + \eta (f_1)^{-1}\right) K \left(1 + \eta (\rho_I)^{-1}\right) \quad (64)$$

or, if we multiply both sides by η , add 1, and take (61) into account:

$$1 + \eta (f_1)^{-1} = \left[1 + (zU_1)^{-1} K\right] [1 + \eta (\rho_I)^{-1}] \quad (65)$$

or again:

$$\frac{\rho_I}{1 + \eta\rho_I} = zU_1 + K \quad (66)$$

In the absence of interaction, K vanishes and we recover (61); K appears therefore as analogous to a correction to zU_1 introduced by the interactions, in other words to a correction to the single particle energy.

To make this analogy more precise, by similarity with (60), we define the energy shift operator $\Delta(1)$ by¹²:

$$1 + (\eta\rho_I)^{-1} = \eta [zU_1(1)]^{-1/2} e^{\beta\Delta(1)} [zU_1(1)]^{-1/2} \quad (67)$$

which immediately leads to:

$$\exp\{-\beta\Delta(1)\} = \left[1 + \frac{1}{\sqrt{zU_1(1)}} K(1) \frac{1}{\sqrt{zU_1(1)}}\right] \quad (68)$$

The series defining the operator $K(1)$ therefore contains all the information on the energy shifts for the single-particle density operator; equation (68) is the equivalent of relation (86) of Appendix II, in an operator form, when quantum statistics is added.

¹² We could also have used another definition of the energy shift operator, by introducing the exponential of a sum instead of the product of exponentials:

$$[1 + (\eta\rho_I)^{-1}] = \eta e^{\beta(H_1(1) + \Delta(1) - \mu)}$$

4.3 Calculating the energy shifts

Our purpose now is to express the energy shift as a function of the density, or of the single particle density operator ρ_I , as we did in classical statistical physics. This raises two problems: first, we have to build an exponential from the infinite series that provides K ; second, we have to understand how the density operator ρ_I appears, instead of the factors $[1 + \eta\rho_I(i)]$ that seem to be systematically present in all terms of the series. We will see that the two problems “cure each other” and that the result the calculation leads to an systematic and satisfactory grouping of the terms for a dense system. To do this, we begin with a simple case, where only the direct term of the mean-field is taken into account.

4.3.1 Direct term

We now take an approximation of expression (63) of K by retaining only the diagrams that contain one single U_2 , one single U_3 , ... one single U_l , ... and where all the U_i operators are connected to l different cycles:

$$K = \begin{array}{c} \text{[Diagram: a square node with a horizontal rectangle on top labeled } [1 + \eta\rho_I] \text{]} \\ + \begin{array}{c} \text{[Diagram: a square node with two horizontal rectangles on top, labeled } [1 + \eta\rho_I] \text{ and } [1 + \eta\rho_I] \text{]} \\ + \dots \end{array} \end{array} \quad (69)$$

Moreover, we replace each Ursell operators U_l by its tree-reducible part. This leads to the equation:

$$\begin{aligned} K(1) = & z^2 \text{Tr}_2 \{U_2(1, 2) [1 + \eta\rho_I(2)]\} \\ & + \frac{z^3}{2!} \text{Tr}_{2,3} \{U_3^R(1, 2, 3) ([1 + \eta\rho_I(2)] [1 + \eta\rho_I(3)])\} \\ & + \dots \\ & + \frac{z^l}{(l-1)!} \text{Tr}_{2,\dots,l} \{U_l^R(1, \dots, l) [1 + \eta\rho_I(2)] \dots \times \\ & \times [1 + \eta\rho_I(l)]\} + \dots \end{aligned} \quad (70)$$

For the sake of simplicity, we will even replace here the operators U_l^R by their non-symmetrized part $\hat{U}_l^R$ (see equation (42)); nevertheless, since at the end we will find an Hermitian operator, this has no consequence on the result. Graphically, if we represent as before the $\sqrt{U_1}$'s by vertical rectangles, U_1 's by squares and multiplication by $[1 + \eta\rho_1]$ by long horizontal rectangles as in figure 4, (70) then corresponds to:

$$\begin{aligned} K(1) = & \frac{z}{1!} \times \begin{array}{c} \text{[Diagram: a square node with a horizontal rectangle on top labeled } [1 + \eta\rho_1] \text{]} \\ + \dots \end{array} \\ & + \frac{z^2}{2!} \left(\frac{2!}{2!} \times \begin{array}{c} \text{[Diagram: a square node with two horizontal rectangles on top, labeled } [1 + \eta\rho_1] \text{ and } [1 + \eta\rho_1] \text{]} \\ + \frac{2!}{1!} \times \begin{array}{c} \text{[Diagram: a square node with a horizontal rectangle on top labeled } [1 + \eta\rho_1] \text{]} \end{array} \right) + \dots \end{aligned} \quad (71)$$

We now notice the same kind of self-similarity of the series than in the case of Boltzmann statistics. There are nevertheless two differences. The first is that the operator that is resummed in the branches is now K , or actually the sum $zU_1 + K$ (the term zU_1 is introduced by the 1 that is present at each node but absent as the first term

in the series); the second is that this operator is multiplied on the right by the factor $[1 + \eta\rho_I]$, so that we get the product:

$$[zU_1 + K] \times [1 + \eta\rho_I] \quad (72)$$

But, according to (66), this product is merely equal to ρ_I . We therefore have:

$$K(1) = \sqrt{U_1(1)} [\exp (\text{Tr}_2 \{ \bar{U}_2(1, 2) \rho_I(2) \}) - 1] \sqrt{U_1(1)} \quad (73)$$

(the -1 arises because the first term of the exponential series is absent from K). Inserting this result into (68) finally provides:

$$-\beta\Delta(1) = \text{Tr}_2 \{ \bar{U}_2(1, 2) \rho_I(2) \} \quad (74)$$

which is exactly the same result as for Boltzmann statistics. We can now check that the final result is Hermitian, so that it was indeed correct to ignore the Hermitian symmetrization of the operators $\hat{U}_l^R$.

4.3.2 Exchange term

We now add exchange terms into (69). An example of such a term is the second term of the right hand side of (63): we have already noticed that this term is obtained by replacing $\bar{U}_2(1, 2)$ by $\bar{U}_2(1, 2)P_{ex}$ in the direct mean-field term associated with the linear density term in K . In other words, the sum of the two terms corresponds to the following substitution:

$$\bar{U}_2(1, 2) \Rightarrow \bar{U}_2(1, 2) [1 + \eta P_{ex}(1, 2)] = 2\bar{U}_2^{S,A}(1, 2) \quad (75)$$

where $P_{ex}(1, 2)$ is the exchange operator for particles 1 and 2. More generally, the question is whether each term in the whole series of terms of (71), which eventually leads to an exponential, contains all exchange terms that are necessary to perform substitution (75).

In order to construct the diagrams which are exchange diagrams for the mean-field, it is useful to remember the origin of each Ursell diagram: it arises from the association of a set of U_l 's (with $l \geq 2$) with permutation cycles; in the diagrams that we have retained so far, only one U_l is present, and each of the l particles is included in a different cycle, containing none of the other particles. Let us now consider two particles, i and k , that sit initially in different cycles; if we apply an additional exchange operator $P_{ex}(i, j)$ to the product of the two cycles, it is easy to see that we obtain a larger cycle with an length which is the sum of the two initial lengths: the two cycles merely coalesce into one. This immediately leads to another Ursell diagram, such as the two first that are shown in figure 5 (a and b) in the particular case $l = 3$. One can then repeat the operation and apply another exchange operator to the result, which will make two more cycles fuse together into an even larger cycle; in this way still another

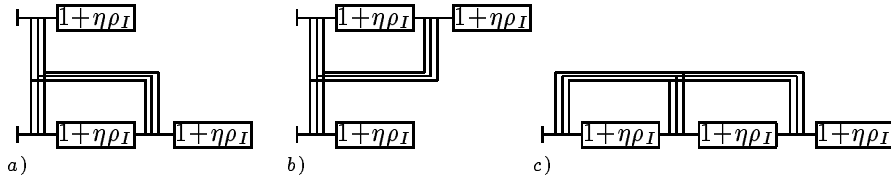


Fig. 5. Exchange diagrams for the case $l = 3$; the direct term from which these diagrams are obtained is the second term in the right hand side of (69).

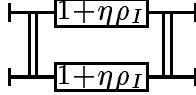


Fig. 6. An example of a “correlation diagram”, where exchange cycles and Ursell operators (U_2 's e.g.) combine to make a “loop”. This diagram provides a contribution which is beyond mean-field.

diagram is obtained, such as the last shown in figure 5 (c). This introduction of exchange may be repeated until all pairs of particles contained in $\bar{U}_2$ links are exchanged, which leads to a maximum cycle of length l containing all of them. Altogether, $2^{l-1} - 1$ different diagrams correspond to all possible ways to fuse together the various cycles; they provide all the exchange diagrams associated with the initial direct diagram.

Finally, we have to replace in all these diagrams U_l by the sum of product of $\bar{U}_2$ operators that corresponds to U_l^R , as we did for the direct terms; we replace the “skeleton” provided by U_l by all possible trees. The result of this operation is the same as for the direct terms: any branching at the root introduce a product of operators, while branching at the other nodes introduces a product inside a partial trace. The situation is thus not different than before, except that two sorts of links now occur, with or without exchange; the summation of the series then provides nothing but the exponential of a sum. We therefore obtain the simple result:

$$-\beta\Delta(1) = \text{Tr}_2 \left\{ \bar{U}_2(1, 2) [1 + \eta P_{ex.}(1, 2)] \rho_I(2) \right\} \quad (76)$$

which shows that it is the symmetrized form of $\bar{U}_2$ that appears naturally in the expression of the mean-field.

4.3.3 Correlations

Can we go further in this exponentiation, and try to include in the energy shift terms such as that corresponding to the diagram of figure 6?

As we have seen, the exponentiation operation involves the consideration of operators that are the square, the cube, etc. of the lowest order operator. Could we somehow consider diagrams such as that of figure 6, but where U_3 are introduced, replace U_3 by a tree diagram, and show

that the result is the square of the initial operator? Actually, this does not seem to be possible. One reason is that the square of an operator such as that shown in figure 6 would involve particle 1 to be part of two independent cycles, a situation that never occurs in Ursell diagrams. For this reason, we have not been able to exponentiate the diagram of figure 6. One possibility is to consider this class of terms as small correction to the mean-field exponential terms, to be treated linearly (as was done for instance in [6]). This is indeed possible above the Bose-Einstein transition point, but it is certainly not correct below this point, as we discuss below. As a consequence, the validity of our calculations is limited to non-condensed Bose systems.

4.4 Physical discussion

The energy shift operator $\Delta(1)$ is reminiscent of the self-energy operator of temperature Green's function's theories, but actually it corresponds to a different notion. Self-energies include a notion of time, or frequency (or Matsubara discrete frequencies), while time evolution is absent from the formalism of Ursell operators: only equilibrium properties are obtained, which excludes notions such as time dependent response functions, collective modes and quasiparticles. In other words, only the equilibrium single particle density operator is calculated, which contains less information (integrated information over all frequencies) than full Green's functions. It is nevertheless interesting to see how the formalism manages to reconstruct the energy exponentials, with or without exchange cycles, and that at the end the mean-field expression simplifies to introduce the single particle density operator itself in a consistent way. It is also worth noticing that the relevant matrix elements to calculate this mean field are not those of the bare interaction potential V_{12} , but rather those of an operator $\bar{U}_2(1, 2)$ that contains V_{12} in an exponential - we have already discussed in § 3.5, its relation with the introduction of the scattering length as the relevant parameter to describe the interactions.

Of course, one should keep in mind that the notion of mean-field is not exact: we have summed only limited classes of diagrams; moreover, we have replaced the U_l 's by their reducible part U_l^R . In the case of bosons for instance, it is known [6][20] that correlation diagrams such as that shown in figure 6 play an essential role just above the Bose-Einstein transition point, and even that the theory takes a non-perturbative character at the transition temperature, so that no limitation to any finite set of diagrams

(or of class of diagrams) is in principle possible. Below the condensation point, the situation is even more dramatic. The reason is that a ladder diagram with M ladders (U_2 operators) and an intermediate state with an extensive population (the condensed state) is proportional to the $\mathcal{V}^{M-2}$ (where $\mathcal{V}$ is the volume), which makes it diverge in the thermodynamic limit as soon as $M \geq 3$: however small the interaction parameter is, these terms will always dominate the others in the thermodynamic limit. A similar situation occurs for the so called “bubble diagrams”. As a consequence, since we have ignored all these correlation diagrams, in their present form our calculations have a validity that is limited to non-condensed boson systems. Actually, one would expect that, in a condensed system, the mean-field should include two different parts, due to excitations and to the condensate respectively, but for the moment we have not explored this question.

5 Conclusion

At the end of their 1938 article, Kahn and Uhlenbeck [21] remark that “[they] have not been able to generalize this physical interpretation of the β_l [(irreducible cluster integrals)] to the quantum theory.” In the present article, we have achieved this goal: we have provided a consistent derivation of the exponentials that introduce the energy shifts Δ , from which the equation of state can in turn be derived as in classical statistical physics. Actually, in the article, we emphasize how the linear density term can be derived, but Appendix III discusses briefly how higher order density terms could also be included. For a classical system, our method is different, and in a sense simpler, than that of Hansen and McDonald [10]; it does not require any reasoning in the complex plane and we have shown how the exponentials of ρ_I appear rather naturally in the calculations. The operator that plays the basic role in all our calculations is $\bar{U}_2(1, 2)$; its matrix elements depend on the asymptotic (long distance) properties of the two body scattering wave functions. But, in fact, $\bar{U}_2(1, 2)$ contains more information than only asymptotic wave functions and phase shifts: it also contains information about short range effects of the potential (atoms in the middle of a collision) as well as about bound states; it would be interesting to explore their consequences on the properties of the mean-field.

The Laboratoire Kastler Brossel (LKB) is Unité Mixte de Recherche du CNRS (UMR 8552) et de l’Université Pierre et Marie Curie (Paris).

APPENDIX I

In this appendix, we explain why classical tree-diagrams consisting of l particles all have the same numerical value,

namely $(\beta_1)^{l-1}$. Let us consider the following integral corresponding to a l particles tree-diagram:

$$T_{diag.} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_l f_{12} \dots f_{ij} \dots f_{kl} \quad (77)$$

Each Mayer function appearing in it depends on the relative distance between two particles:

$$f_{ij} = f(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = f(r_{ij}) \quad (78)$$

Let $\mathbf{x}_k$ be the relative position vector between particle k and the preceding particle in the branch starting from the root. There is $l-1$ such vectors ($k = 2$ to l). The important thing to notice is that each Mayer function depends on only one $\mathbf{x}_k$, and that two Mayer functions in the product necessarily depend on different $\mathbf{x}_k$. Let

$$\mathbf{R} = \frac{1}{l} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \dots + \mathbf{r}_l) \quad (79)$$

be the center of “mass” position vector. Then making a change of variables in the integral from $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_l)$ to $(\mathbf{R}, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_l)$ (the Jacobian is one), we obtain:

$$T_{diag.} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3R d^3x_2 \dots d^3x_l f(x_2) \dots f(x_l) \quad (80)$$

We can then integrate over the variable $\mathbf{R}$ to get rid of the volume factor. The $l-1$ integrals that are left separate so that:

$$T_{diag.} = \int d^3x_2 f(x_2) \dots \int d^3x_l f(x_l) = \left(\int d^3x f(x) \right)^{l-1} \quad (81)$$

But the integral of the Mayer function is precisely what we called the first irreducible cluster integral β_1 (see equation (15)), so that we finally get:

$$T_{diag.} = (\beta_1)^{l-1} \quad (82)$$

APPENDIX II

In this appendix, we emphasize the similarity between the equation that gives the energy shift as a function of the density and the elimination of z between (2) and (3) that provides the equation of state. For simplicity, we assume that no external potential acts on the particles, so that translational invariance is satisfied. We call ρ_k the diagonal elements of ρ_I :

$$\rho_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k} | \rho_I | \mathbf{k} \rangle \quad (83)$$

and $u_1(\mathbf{k})$ those of U_1 :

$$u_1(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} | U_1 | \mathbf{k} \rangle = e^{-\beta e_k}$$

where e_k is the single particle kinetic energy. As for the diagonal elements of U_2 in the momentum representation, we note them:

$$u_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U_2 | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle$$

(for the moment we do not make the MIME approximation), $u_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ for those of U_3 , etc. Equation (35) then provides:

$$\rho_{\mathbf{k}} = u_1(\mathbf{k}) \left[z + z^2 \sum_{\mathbf{k}'} u_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) u_1(\mathbf{k}') + \frac{z^3}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} u_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) u_1(\mathbf{k}') u_1(\mathbf{k}'') + \dots \right] \quad (84)$$

Now, if we introduce the energy shift $\Delta(\mathbf{k})$ by the relation:

$$\rho_{\mathbf{k}} = z u_1(\mathbf{k}) \times e^{-\beta \Delta(\mathbf{k})} \quad (85)$$

we obtain:

$$e^{-\beta \Delta(\mathbf{k})} = 1 + z \sum_{\mathbf{k}'} u_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) u_1(\mathbf{k}') + \frac{z^2}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} u_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) u_1(\mathbf{k}') u_1(\mathbf{k}'') + \dots \quad (86)$$

In this relation, we express the energy shift $\Delta(\mathbf{k})$ as a function of a series in power of the populations $z u_1(\mathbf{k})$ of the ideal gas; but if we write:

$$e^{-\beta \Delta(\mathbf{k})} = 1 + \sum_{\mathbf{k}'} u_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) e^{\beta \Delta(\mathbf{k}')} \rho_{\mathbf{k}'} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} u_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) e^{\beta [\Delta(\mathbf{k}') + \Delta(\mathbf{k}'')]} \rho_{\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}''} + \dots \quad (87)$$

we obtain another expression where only the actual populations $\rho_{\mathbf{k}'}$ play a role, and from which the variable z has now disappeared. Finally, it is sufficient to take the logarithm of the right hand side of this series to obtain the expression of the energy shift $\Delta(\mathbf{k})$ as a function of the populations as well as all the other energy shifts $\Delta(\mathbf{k}')$.

In the MIME approximation, the interactions constants u_2, u_3 , etc. factorize out of the sums, the energy shift becomes a constant Δ that is independent of $\mathbf{k}$, and one merely obtains:

$$e^{-\beta \Delta} = 1 + u_2 e^{\beta \Delta} N + \frac{u_3}{2} e^{2\beta \Delta} N^2 + \dots \quad (88)$$

where $N \equiv \langle N \rangle$ is the mean total number of particles (the trace of ρ_I). This equation provides an implicit equation between the energy shift Δ and the density $\rho = N/V$ (since u_2 is proportional to the inverse volume, u_3 to the square of this inverse volume, etc.) From this result, one can expand the energy shift in powers of the density:

$$\Delta = u_2 N + u'_3 N^2 + u'_4 N^3 + \dots \quad (89)$$

where the new coefficients $u'_3, u'_4, \dots$ can be calculated step by step by inserting this relation into (88); here again, the first term in the right hand side of (89) corresponds to the mean-field, and the following terms to density corrections. We note the similarity between this result and the usual elimination of z between the two z -expansions of the pressure and the density, which provides the equation of state, where only the actual density of the system appears. We

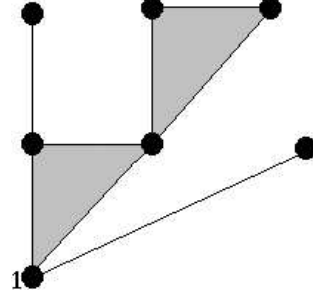


Fig. 7. An example of a diagram including irreducible parts $\bar{U}_3^{irr}$ of the three particle Ursell operator U_3 , symbolized by triangles, in addition to straight lines representing the $\bar{U}_2$'s. Such diagrams contribute to a term in the energy shift which is quadratic in ρ_I .

also remark that, in general, the energy shift has a contribution that is linear in density, which can be called mean-field, but also higher order density terms (density corrections to the mean-field).

APPENDIX III

We have defined in section 3.2 the reducible part $\bar{U}_l^R(1, 2, \dots, l)$ of any Ursell operator $\bar{U}_l(1, 2, \dots, l)$ in terms of “trees” made of chains of $\bar{U}_2$ operators. For instance, the Ursell operator of order $l = 3$ then becomes the sum of a tree-reducible part and of an irreducible part:

$$\bar{U}_3(1, 2, 3) = \bar{U}_3^R(1, 2, 3) + \bar{U}_3^{irr}(1, 2, 3) \quad (90)$$

In this appendix, we sketch how the notion of reducibility could be generalized: the irreducible part $\bar{U}_3^{irr}$ could be used, exactly as $\bar{U}_2$, as a starting point to define a “ $\bar{U}_3$ -reducible” part of all operators $\bar{U}_l$ with $l \geq 4$ in terms of products of $\bar{U}_2$'s and $\bar{U}_3^{irr}$'s.

The basic idea is to build trees, not only with lines that represent $\bar{U}_2$'s, but also with triangles that represent $\bar{U}_3^{irr}$'s. Figure 7 shows an example of such a tree: at each branching point, one may now connect either lines, or one corner of a triangle; in the latter case, the two other corners can be used as starting points in order to extend the branch further, with any product of $\bar{U}_2$'s and $\bar{U}_3^{irr}$'s. One difference is that, because each $\bar{U}_3^{irr}$, once added, introduces two new possible branching points (instead of a single one for a $\bar{U}_2$), the question arises as to which one is represented first in the clockwise order; it is easy to see that this introduces a $1/2$ factor per $\bar{U}_3^{irr}$ contained in the diagram into the corresponding weight. Otherwise, not much is changed, provided of course all branching factors (including those resulting from $\bar{U}_3^{irr}$'s) are included in the weight; in other words, in formula (28), a factor $(1/2)^{n_3}$ is added (where n_3 is the number of $\bar{U}_3^{irr}$'s), and the ramification factors r_i now include the effect of $\bar{U}_3^{irr}$'s. This

being done, the property of self similarity appears again in the series, and the essence of the reasoning still holds with relatively minor changes.

Finally, one is led to the introduction of an exponential:

$$e^{-\beta\Delta(1)} \quad (91)$$

where $\Delta(1)$ would now be given by the sum:

$$-\beta\Delta(1) = Tr_2 \{ \bar{U}_2(1, 2) \rho_I(2) \} + \\ + Tr_{2,3} \left\{ \frac{1}{2!} \bar{U}_3^{Irr.}(1, 2, 3) \rho_I(2) \rho_I(3) \right\} \quad (92)$$

In other words, the energy shift would no longer be proportional to the single particle density operator, but would contain a term that is quadratic in ρ_I . Similarly, one can expect that the irreducible part $\bar{U}_4^{Irr.}$ of $\bar{U}_4$ would lead to a contribution to the energy shift that is cubic in ρ_I , and so on. We have not yet performed these calculations.

References

1. L.P. Kadanoff, G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, 1962).
2. A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, I.E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, 1963).
3. A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw Hill, 1971).
4. P. Grüter, F. Laloë, J. Physique **5**, (1995) 181.
5. P. Grüter, F. Laloë, J. Physique **5**, (1995) 1255.
6. M. Holzmann, P. Grüter, F. Laloë, Eur. Phys. J. **B10**, (1999) 739.
7. J.E. Mayer, M. Goeppert Mayer, *Statistical Mechanics*, 2nd edition (Wiley, 1975).
8. H.D. Ursell, Proc. Camb. Phil. Soc. **23**, (1927) 685.
9. G.E. Uhlenbeck, G.W. Ford, *Lectures in Statistical Mechanics* (American Mathematical Society, 1962).
10. J.P. Hansen, I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, 2nd edition (Academic Press, 1986) chap.4.
11. J.E. Mayer, M. Goeppert Mayer loc. cit. p.258.
12. J.P. Hansen, I.R. McDonald loc. cit. p.91.
13. T. Morita, K. Hiroike, Prog. Th. Phys. **25**, (1961) 537.
14. C. de Dominicis, J. Math. Phys. **3**, (1962) 983 and **4**, (1963) 255.
15. N.G. Van Kampen, Physica **27**, (1961) 783.
16. W.J. Mullin, Am. J. Physics **40**, (1972) 1473.
17. T.D. Lee, C.N. Yang, Phys. Rev. **87**, (1952) 404.
18. M. Holzmann, PhD thesis, Paris (2000).
19. P. Grüter, F. Laloë, A.E. Meyerovich, W.J. Mullin, J. Physique **7**, (1997) 485.
20. G. Baym, J.P. Blaizot, M. Holzmann, F. Laloë and D. Vautherin, Phys. Rev. Lett. **83**, (1999) 1703.
21. B. Kahn, G.E. Uhlenbeck, Physica **5**, (1938) 399.

Annexe B

Internal state conversion in ultracold gases

Réf. [27]. Publié dans Phys. Rev. Lett. **88**, 230404 (2002).

Internal State Conversion in Ultracold Gases

J. N. Fuchs,* D. M. Gangardt,^{†,‡} and F. Laloë[§]

LKB, Laboratoire de Physique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

(Received 21 December 2001; published 23 May 2002)

We consider an ultracold gas of (noncondensed) bosons or fermions with two internal states, and we study the effect of a gradient of the transition frequency between these states. When a $\pi/2$ rf pulse is applied to the sample, exchange effects during collisions transfer the atoms into internal states which depend on the direction of their velocity. This results, after a short time, in a spatial separation between the two states. A kinetic equation is solved analytically and numerically; the results agree well with the recent observations of Lewandowski *et al.*

DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.230404

PACS numbers: 03.75.Fi, 05.30.-d, 51.10.+y

In the last few years, the study of ultracold gases has generated a wealth of very interesting results. Spectacular examples are given by Bose condensed gases, but gases above their degeneracy temperature also provide exciting and unexpected results. For instance, recent experiments by Lewandowski *et al.* [1] have shown the existence of a remarkable phenomenon, observed when a rf pulse is applied to a ^{87}Rb gas with two internal states, cooled by laser irradiation and evaporative cooling (but not Bose condensed). Since the two internal states are similar to two different species of atoms, the authors describe their observation as a “segregation” between the species. They also mention that the differential Stern-Gerlach force, due to the magnetic gradient acting on the species, is too small to explain the segregation, which is actually related to interactions between the atoms. The purpose of the present Letter is to show that the “identical spin rotation effect” (ISRE) provides a qualitative and a quantitative explanation of the observations.

The ISRE was introduced in [2] as a microscopic phenomenon taking place during a binary collision between two identical atoms with internal degrees of freedom, nuclear spins, for instance. The effect is a consequence of quantum indistinguishability; it introduces a rotation of each spin around their sum (in opposite directions for bosons and fermions). For instance, if a single atom with a spin polarization in a given direction crosses a gas of identical atoms polarized in another direction, the spin of the transmitted atom undergoes a rotation; this is similar to the rotation of the polarization of photons in the Faraday effect. On a macroscopic scale, the effect can affect transport properties of gases with internal states. For instance, Ref. [3] considers a gas which is in a “classical” regime in terms of equilibrium properties, but where quantum effects are important in binary collisions. When the density is sufficient to reach a hydrodynamic regime, this work shows the existence of transverse spin waves, analogous to spin waves in degenerate liquid ^3He [4]. Similar predictions had been made independently by Bashkin [5] from a more macroscopic point of view, based on the notion of “molecular field” (or mean field)—see also the work of Lévy and Ruckenstein [6]. Transverse spin waves

in gases were subsequently observed in $\text{H}\downarrow$ [7] as well as in helium [8,9].

Another prediction made in Ref. [3] (end of Sec. 1) is that the ISRE can also create “longitudinal oscillations” when a $\pi/2$ pulse is applied to the sample, provided the transverse spin polarization is inhomogeneous. Here we show that the phenomenon described in Ref. [1] is precisely this effect, transposed to the pseudospin associated with the two hyperfine levels relevant in the experiment, as foreseen by the authors who mention a “longitudinal spin effect” in their conclusion. The major differences are that the experiment was performed at a density where the hydrodynamic regime is not reached and that the spin oscillations are not of small amplitude.

A point which emerged from the early studies on spin waves in gases, sometimes after vivid controversy, is that the effect of binary collisions in a gas are well described by a simple mean field calculation, provided one considers forward scattering only. In condensed matter, each particle interacts at the same time with several others; it seems natural that their individual effects should be well averaged by the test particle so that mean field theory should apply. By contrast, in a dilute gas, particles are “free almost all the time”; they interact only during brief collisions, with a single partner with which they can develop strong correlations. Indeed, in atomic physics, one rarely studies collision processes within mean field theory. Nevertheless, it turns out that the average effect of many collisions in the forward direction is equivalent to the results of mean field theory, if one replaces the real binary interaction potential by a pseudopotential involving directly the scattering length (using the real potential would lead to meaningless results); the equivalence holds in the limit of low collision energy (the ISRE in the forward direction dominates over lateral scattering at very low energies since the corresponding “cross section” $\tau_{\text{ex}}^{\text{fwd}}$ diverges [2]).

In the experimental conditions of Ref. [1], the atoms are in an axially symmetric magnetic trap elongated in the Ox direction. Initially the gas is at equilibrium with only state 1 populated. One then applies a $\pi/2$ rf pulse which, suddenly, puts all the atoms into the same coherent superposition of states 1 and 2, corresponding to a uniform

transverse polarization of the pseudospin. The system is then left free to evolve, and one observes the time evolution of the local densities n_1 and n_2 .

We begin with a qualitative physical discussion of the sequence of events. Since the field gradient creates an inhomogeneous spin precession, the gas develops a gradient of transverse spin orientation: correlations are created between position and transverse spin orientation. The free thermal motion of the atoms then creates correlations between velocity and transverse spin. Thus, a particle moving with a given velocity at point x gets a spin polarization which is not parallel to the average local spin polarization, so that the ISRE precession takes place. This makes its spin polarization leave the transverse plane and develop a nonzero value of its longitudinal component, with an opposite sign for different signs of the x component of the velocity of the atom. The appearance of this component indicates the beginning of an internal conversion, which eventually results in spatial separation of the atoms in different internal states. We emphasize that the apparent segregation is not the result of a spatial separation of atoms in fixed internal states, as for two different chemical species; on the contrary, without changing their spatial position, the ISRE transfers atoms into internal states that depend on their motion.

For a more quantitative discussion, we use a transport equation in terms of a time t dependent operator $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, which depends on position $\mathbf{r}$ and momentum $\mathbf{p}$; $\hat{\rho}$ is the Wigner transform with respect to orbital variables of the single particle density matrix; it remains a 2×2 operator in the space of internal variables, corresponding to states 1 and 2. Instead of using the four matrix elements of $\hat{\rho}$, it is often convenient to replace them by a local density f and (pseudo) spin density $\mathbf{M}$ in phase space defined by

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2}[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)\hat{I} + \mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \hat{\sigma}], \quad (1)$$

where $\hat{I}$ is the unit operator in spin space and $\hat{\sigma}$ is the spin operator whose three components are the Pauli matrices. The kinetic equation for $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ (see, for instance, [2]) is

$$\partial_t \hat{\rho} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho} - \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}, \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{U}(\mathbf{r}, t)]_+ + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}, \hat{U}(\mathbf{r}, t)]_- = I_{\text{coll}}[\hat{\rho}], \quad (2)$$

where the second term is the usual drift term (m is the mass of the particles); the third term (anticommutator) is the force term including both the effect of the trapping potential and of the mean field created by the other atoms; the fourth term (commutator) is a spin precession term containing the ISRE as well as some other contributions that we discuss below—this commutator is the term on which we focus our attention in this Letter. On the right-hand side, the collision integral $I_{\text{coll}}[\hat{\rho}]$ describes “real” collisions (lateral scattering as opposed to forward scattering, already included in the mean field); it can be obtained,

for instance, from the Lhuillier-Laloë transport equation [2], or even take a more detailed expression containing “nonlocal collision terms” with $\mathbf{r}$ and $\mathbf{p}$ gradients, as discussed, e.g., in the appendix of [10] and [11]. In fact, if we are mostly interested in a Knudsen regime, the precise expression of $I_{\text{coll}}[\hat{\rho}]$ is not needed. The effective potential $\hat{U}(\mathbf{r}, t)$ is the spin operator

$$\hat{U}(\mathbf{r}, t) = U_0(\mathbf{r}, t)\hat{I} + \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\sigma}, \quad (3)$$

where the scalar component is defined by

$$U_0 = \frac{V_1 + V_2}{2} + g_{22}^\epsilon n_2 + g_{11}^\epsilon n_1 + \frac{g_{12}^\epsilon}{2}(n_2 + n_1). \quad (4)$$

Here V_1 and V_2 are the external trapping potentials acting on states 1 and 2; the g^ϵ 's have the following expressions in terms of the usual “coupling constants” g , proportional to the appropriate scattering lengths associated with the various possibilities for pair interactions between atoms in levels 1 or 2 [12]:

$$g_{11,22}^\epsilon = g_{11,22}(1 + \epsilon)/2; \quad g_{12}^\epsilon = g_d + \epsilon g_t, \quad (5)$$

where g_d and g_t refer to the direct and transfer process for two atoms in different levels. The number densities of atoms in levels 1 and 2 are $n_{1,2}$; $\epsilon = +1$ (-1) for bosons (fermions). The vectorial component of $\hat{U}(\mathbf{r}, t)$ is

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar\Omega(\mathbf{r}, t)}{2} \mathbf{e}_{\parallel} + \epsilon \frac{g_{12}^\epsilon}{2} \mathbf{m}(\mathbf{r}, t); \quad (6)$$

$\mathbf{e}_{\parallel}$ is the unit vector in the longitudinal spin direction, and $\Omega(\mathbf{r}, t)$ is

$$\hbar\Omega = V_2 - V_1 + 2g_{22}^\epsilon n_2 - 2g_{11}^\epsilon n_1 + 2g_{12}^\epsilon(n_1 - n_2), \quad (7)$$

where the total density n and spin polarization $\mathbf{m}$ are

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d^3p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t); \quad (8)$$

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$$

and $n_{1,2} = (n \mp m_{\parallel})/2$. The first contribution (7) to $\mathbf{U}$ acts as a “local magnetic field”; its average value over the sample can be removed in a uniformly rotating frame. The second contribution originates from the ISRE and is proportional to the local spin polarization $\mathbf{m}$ (only $\mathbf{m}$ enters the ISRE commutator because the $1/k$ divergence of $\tau_{\text{ex}}^{\text{fwd}}$ at low k 's [2] compensates the relative velocity factor of the collision integral). The commutator makes $\mathbf{M}$ precess around the momentum integrated local spin polarization; it does not affect the evolution of $\mathbf{m}$ itself but can change the evolution of $\mathbf{M}$ for each value of $\mathbf{p}$.

A few simplifying assumptions are appropriate in the experimental conditions of [1]. The confining energy is of order $k_B T \approx 13 \text{ kHz} \times h$ which is much larger than the mean field interaction energy $gn(0) \approx 140 \text{ Hz} \times h$ and

the differential trapping energy $V_1 - V_2 \sim 10 \text{ Hz} \times h$. In the anticommutator this allows us to retain only the confining energy of the harmonic trap:

$$U_0 \simeq \frac{V_1 + V_2}{2} = \frac{1}{2} m[\omega^2 x^2 + \omega_{\text{rad}}^2 (y^2 + z^2)]; \quad (9)$$

here ω and ω_{rad} are the axial and radial trapping frequencies. In the commutator of (2), U_0 disappears, and only the vectorial component $\mathbf{U}$ plays a role. The cigar shaped trap has an axial frequency $\omega/2\pi = 7 \text{ Hz}$, much smaller than the radial frequency $\omega_{\text{rad}}/2\pi = 230 \text{ Hz}$, so that the system is quasi-one-dimensional along the x axis. Assuming that radial local equilibrium is quickly established in the yz plane, we introduce the on-axis value $\hat{\rho}(x, p, t)$ (integrated over radial momenta). When averaged over radial coordinates and momenta, Eq. (6) becomes

$$\bar{\mathbf{U}}(x, t) = \hbar \bar{\Omega}(x) \mathbf{e}_{\parallel} / 2 + \epsilon g_{12}^{\epsilon} \mathbf{m}(x, t) / 4, \quad (10)$$

where $\hbar \bar{\Omega} = \bar{V}_2 - \bar{V}_1 + (g_{22}^{\epsilon} - g_{11}^{\epsilon})n/2$; note that the coupling constants are renormalized by a factor of $1/2$ upon averaging [13]; we have assumed that $2g_{12}^{\epsilon} \simeq g_{11}^{\epsilon} + g_{22}^{\epsilon}$.

With these assumptions the initial equilibrium Maxwell-Boltzmann distribution $f(x, p)$ solves the kinetic equation (2), so that the dynamics after the pulse can be expressed in terms of $\mathbf{M}$ only. When lengths are measured in units of $x_T = \sqrt{k_B T / m \omega^2}$, momenta in units of $p_T = \sqrt{m k_B T}$, and times in units of $1/\omega$, Eq. (2) simplifies into

$$\partial_t \mathbf{M} + p \partial_x \mathbf{M} - x \partial_p \mathbf{M} - \frac{2\bar{\mathbf{U}}}{\hbar \omega} \times \mathbf{M} \simeq - \frac{\mathbf{M} - \mathbf{M}^{\text{eq}}}{\omega \tau_M}, \quad (11)$$

where a simple relaxation-time approximation has been made for I_{coll} with a single parameter τ_M of the order of the time between collisions; the local equilibrium value $\mathbf{M}^{\text{eq}} = \mathbf{m}(x, t) \exp(-p^2/2) / \sqrt{2\pi}$. This is the equation that we now discuss.

For small times we can use a time expansion $\mathbf{M}(x, p, t) = \mathbf{M}^{(0)} + \mathbf{M}^{(1)}t + \mathbf{M}^{(2)}t^2/2 + \dots$ and solve (11) to each time order. The spin distribution immediately after the $\pi/2$ pulse is unchanged, except that $\mathbf{M}^{(0)}(x, p)$ is perpendicular to $\mathbf{e}_{\parallel}$. The density profile $n(x)$ remains Gaussian, so that the Bohr frequency $\bar{\Omega}(x)$ does not vary in time. The effect of real collisions [right-hand side of (11)] is neglected since we are interested in small time behavior only. The result of this calculation is that $m_{\parallel}(x, t)$ starts as t^4 with $m_{\parallel}^{(4)}(x) = \epsilon g_{12}^{\epsilon} n(x) [\bar{\Omega}''(x)n(x) + \bar{\Omega}'(x) \times \{n'(x) - xn(x)\}] / 2\hbar$ in dimensionless form. Using the fact that the density $n(x)$ remains Gaussian and restoring the units, we get

$$\frac{m_{\parallel}(x, t)}{n(x)} = \frac{n_2 - n_1}{n} = \frac{\epsilon g_{12}^{\epsilon} n}{\hbar \omega} \frac{\bar{\Omega}'' x_T^2}{\omega} - \frac{2\bar{\Omega}' x}{\omega} \frac{(\omega t)^4}{48}. \quad (12)$$

The first factor on the right-hand side is of the order of the dimensionless ISRE constant $g_{12}n(0)/\hbar\omega$. Since its value in the experiment of Ref. [1] is ~ 20 , it is not surprising

that species separation could be observed in a time smaller than the trap period. The second factor involves the spatial variations of $\bar{\Omega}(x)$; near the center of the trap, a positive curvature implies a positive $m_{\parallel}$ ($n_2 \geq n_1$), in accordance with the results of [1] ($\tau_{\text{ex}}^{\text{fwd}} < 0$). Inserting the values of the parameters of the experiment of [1] into (12) leads to significant species separation ($m_{\parallel} \sim n$) for $\sim 25 \text{ ms}$, to be compared with the observed 30–50 ms.

The maximum of the phenomenon can also readily be understood. For short times, we have seen that positive velocities along x correspond to one sign for the transverse orientation, and conversely. For times greater than $2\pi/\sqrt{\omega \delta \Omega}$ [$\delta \Omega$ is the variation of $\bar{\Omega}(x)$ between the center and the edge of the cloud], both velocity signs become correlated to all spin directions in the transverse plane, so that the apparent segregation effect averages out to zero. Typical values taken from the experiment of [1] give $\sim 100 \text{ ms}$ for the maximum of the phenomenon.

When, eventually, two separated species recombine under the effect of the restoring force of the trap, the ISRE plays no role anymore. The reason is merely that the operator associated with transverse spin is diagonal in the position representation (but not in the spin space), so that it can have nonzero value only if the wave packets associated with each internal state overlap. In the absence of transverse polarization, the system is equivalent to a classical mixture of two gases.

Numerically, Eq. (11) can be solved by propagating the initial distribution in time with the Lax-Wendroff method (see, e.g., [14]), with parameters taken from Ref. [1]. The Bohr frequency $\bar{\Omega}(x)$ is taken to be an inverted Gaussian of depth $\delta \Omega$ and half width x_T . The dimensionless ISRE constant is $g_{12}n(0)/\hbar\omega = 20$. The relaxation time is $\tau_M \sim 10 \text{ ms}$ [1], so that $\omega \tau_M \simeq 0.3$. The time evolution of the spin polarization at the center of the trap $\mathbf{m}(0, t)$ is shown in Fig. 1, with no adjustable parameter. The longitudinal spin polarization rises as predicted by (12), reaches

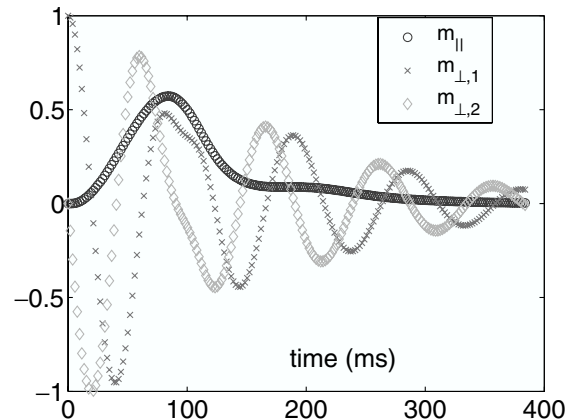


FIG. 1. Time evolution of the spin polarization $\mathbf{m}$ at the center of the trap; $m_{\parallel}$ corresponds to the population difference between the two states; $m_{\perp,1}$ and $m_{\perp,2}$ are the two components of the transverse spin polarization. The center-to-edge difference in Bohr frequency $\delta \Omega / 2\pi$ is 12 Hz.

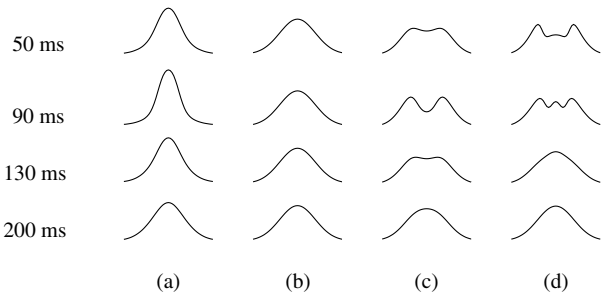


FIG. 2. Evolution of the particle density in state 1; $\delta\Omega/2\pi$ and $g_{12}n(0)/\hbar\omega$ are (a) -12 Hz, 20 (b) 0 Hz, 20 (c) 12 Hz, 20 (d) 30 Hz, 30. Note the good agreement with Fig. 3 of [1], including the sign of the effect and higher order effects.

a maximum around 90 ms, and then oscillates and decays to almost zero after 300 ms. Even in the pure Knudsen regime ($\tau_M = \infty$), a strong maximum of $m_{||}$ is reached around 100 ms. Figure 1 also shows how the other components of the polarization oscillate and decay. An interesting feature of the experiment of Ref. [1] is that neither the hydrodynamic nor the collisionless regime is valid along the axis as $\omega\tau_M \sim 1$, so that a study of the full phase-space dynamics is necessary.

Figure 2 shows the time evolution of n_1 as a function of $\delta\Omega$, the variation of $\overline{\Omega}(x)$ between the center and the edge of the atomic cloud, and of $g_{12}n(0)/\hbar\omega$. When the curvature is zero [column (b)], no state separation occurs. Columns (a) and (c) show the effect of spin conversion for negative and positive curvature $\delta\Omega$ (at the center). For negative curvature, the atoms in state 1 are pulled towards the center of the trap, whereas for positive curvature they are expelled from it. Column (d) exhibits what authors of Ref. [1] call “higher order effects,” for sufficiently large values of $\delta\Omega$ and $g_{12}n(0)/\hbar\omega$. These figures are in good qualitative agreement with Fig. 3 in Ref. [1].

In conclusion, the ISRE plays an important role in the dynamics of cold gases with internal states. In the experiment of Ref. [1], this effect creates large longitudinal spin oscillations in a nonhydrodynamic regime. Our calculations are also valid for fermions [15], where similar effects could be observed, in a case where $g_{11}^\epsilon = g_{22}^\epsilon = 0$ and the ISRE changes sign. Another interesting possibility is tuning the effect by changing g_{12}^ϵ at a Feshbach resonance [16]. Finally we note that, strictly speaking, our study is limited to nondegenerate gases; nevertheless, for noncondensed systems, most of the effect of degeneracy can be included by simply replacing the Maxwell-Boltzmann distribution by the appropriate quantum distribution [17], so that no dramatic change is expected.

We are grateful to Eric Cornell for explaining the results of his group prior to publication, and for several useful discussions. We also thank L. S. Levitov for pointing out to us the importance of radial averaging [13]. Le LKB est UMR 8552 du CNRS, de l’ENS et de l’Université P. et M. Curie.

Note added.—While this Letter was being written, we became aware of the work of Oktel and Levitov [18], who reach conclusions similar to ours. Nevertheless, they use a hydrodynamic expression for the evolution of the spin current, while here we put more emphasis on the intermediate and Knudsen regimes.

*Email address: fuchs@lkb.ens.fr

†Email address: gangardt@lkb.ens.fr

‡Also at Department of Physics, Technion, 32000 Haifa, Israel.

§Email address: laloe@lkb.ens.fr

- [1] H. J. Lewandowski, D. M. Harber, D. L. Whitaker, and E. A. Cornell, cond-mat/0109476.
- [2] C. Lhuillier and F. Laloë, J. Phys. (Paris) **43**, 197 (1982).
- [3] C. Lhuillier and F. Laloë, J. Phys. (Paris) **43**, 225 (1982); Phys. Rev. Lett. **54**, 1207 (1985).
- [4] A. J. Leggett, J. Phys. C **3**, 448 (1970).
- [5] E. P. Bashkin, JETP Lett. **33**, 8 (1981); JETP **60**, 1122 (1984); Sov. Phys. Usp. **29**, 238 (1986).
- [6] L. Lévy and A. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **52**, 1512 (1984).
- [7] B. R. Johnson, J. S. Denker, N. Bigelow, L. P. Lévy, J. H. Freed, and D. M. Lee, Phys. Rev. Lett. **52**, 1508 (1984).
- [8] G. Tastevin, P. J. Nacher, M. Leduc, and F. Laloë, J. Phys. Lett. **46**, 249 (1985).
- [9] W. J. Gully and W. J. Mullin, Phys. Rev. Lett. **52**, 1810 (1984).
- [10] F. Laloë and W. J. Mullin, J. Stat. Phys. **59**, 725 (1990).
- [11] A. E. Meyerovich, Phys. Rev. B **39**, 9318 (1989).
- [12] All the microscopic processes are purely elastic.
- [13] L. S. Levitov (private communication); see also [18].
- [14] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, Cambridge, 1986), Chap. 17.
- [15] B. DeMarco and D. S. Jin, cond-mat/0109098.
- [16] E. G. M. van Kempen, S. J. J. M. F. Kokkelmans, D. J. Heinzen, and B. J. Verhaar, cond-mat/0110610; T. Loftus, C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn, and D. S. Jin, cond-mat/0111571.
- [17] W. J. Mullin and J. W. Jeon, J. Low Temp. Phys. **88**, 433 (1992); K. Miyake, W. J. Mullin, and P. C. Stamp, J. Phys. (Paris) **46**, 663 (1985).
- [18] M. Ö. Oktel and L. S. Levitov, preceding Letter, Phys. Rev. Lett. **88**, 230403 (2002).

Annexe C

Castaing's instability in a trapped ultracold gas

Réf. [28]. A paraître dans Eur. Phys. J. D (arXiv :cond-mat/0209506).

Castaing's instability in a trapped ultra-cold gas

J.N. Fuchs^a, O. Prévoté^{b,c} and D.M. Gangardt^d

Laboratoire Kastler Brossel, Département de Physique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

Received: date / Revised version: date

Abstract. We consider a trapped ultra-cold gas of (non-condensed) bosons with two internal states (described by a pseudo spin) and study the stability of a longitudinal pseudo spin polarization gradient. For this purpose, we numerically solve a kinetic equation corresponding to a situation close to the experiment at JILA [1]. It shows the presence of Castaing's instability of transverse spin polarization fluctuations at long wavelengths. This phenomenon could be used to create spontaneous transverse spin waves.

PACS. 03.75.Fi Phase coherent atomic ensembles; quantum condensation phenomena – 51.10.+y Kinetic and transport theory of gases – 75.30.Ds Spin waves

1 Introduction

Recent experiments [1] with a trapped ultra-cold (non condensed) Bose gas with two internal states have shown the existence of interesting relative population dynamics. Theoretical studies [2][3] making use of a pseudo spin description for the internal states have explained this phenomenon as pseudo spin oscillations due to the “identical spin rotation effect” (ISRE) [4] which appears when the temperature is low enough for the binary collisions to be in the quantum regime. Alternatively, this mechanism can be understood as a “spin mean-field” [5]. In a polarized system, this implies the existence of low energy excitations of the transverse spin polarization, named spin waves. The prediction of spin waves in dilute gases [5][6] as well as their observations in $\text{H}\downarrow$ and helium [7] goes back to the 1980's. Shortly later, Castaing [8] showed that a strong gradient of longitudinal spin polarization is unstable with respect to transverse fluctuations. His study focused on homogeneous polarized ^3He gas and assumed that the spin waves were in the hydrodynamic regime. The purpose of this article is to provide a quantitative study of the existence of Castaing's instability in an inhomogeneous system relevant to the experimental situation at JILA [1]. In this experiment, neither the hydrodynamic nor the collisionless regime for the spin oscillations are reached. This work is motivated by the recent contribution of Kuklov and Meyerovich [9], who were the first to suggest and study the existence of Castaing's instability

in this context. For completeness, one should be aware of the numerical studies of Castaing's instability in polarized Fermi fluids, which are based on the solution of the Leggett equations rather than the full kinetic equation [10].

2 Kinetic equation; Leggett equations

The physical situation we consider is close to that of the experiment at JILA [1]: ^{87}Rb atoms (bosons) with two hyperfine states of interest (denoted by 1 and 2) are confined in an axially symmetric magnetic trap elongated in the Ox direction. The temperature T is about twice the critical temperature for Bose-Einstein condensation, so that the gas is non-degenerate (Boltzmann gas). However, the de Broglie thermal wavelength is much larger than the scattering length so that the collisions occur in the quantum regime. It is convenient to consider the pseudo spin associated with the two hyperfine states 1 and 2 (the basis in spin space is denoted by $\{e_{\perp,1}; e_{\perp,2}; e_{\parallel}\}$). Initially the spin polarization is longitudinal (i.e. along the “effective external magnetic field”) and has a strong spatial gradient. For example, on the left (resp. right) of the trap center, the cloud of atoms is mostly in state 1 (resp. 2). This might be achieved, for example, by preparing a cloud of atoms in state 1 and a cloud of atoms in state 2 separated by a sharp optical potential barrier at the center of the magnetic trap. After removal of the optical barrier, as the two clouds mix, a strong longitudinal spin polarization gradient appears in the region of overlap. If it is strong enough, one should be able to observe the appearance of a large transverse component of the spin polarization as a result of Castaing's instability.

To study this system, we write an effective one dimensional kinetic equation [2] in terms of a local den-

^a email: fuchs@lkb.ens.fr

^b *Present address:* Université de Cergy-Pontoise, Département de Physique, 5 mail Gay Lussac, Neuville sur Oise, 95031 Cergy Pontoise, France

^c email: olivier.prevoté@voila.fr

^d email: gangardt@lkb.ens.fr

sity in phase space $f(x, p, t)$ and (pseudo) spin density $\mathbf{M}(x, p, t)$, where x is the position, p the momentum, and t the time. The one dimensional description for an elongated system is justified by the time scale separation associated with radial and axial motions characterized by frequencies ω_{rad} and ω_{ax} respectively. In the experiment at JILA, $\omega_{rad}/2\pi = 230$ Hz and $\omega_{ax}/2\pi = 7$ Hz [1]. The time scales differ by more than an order of magnitude leading to an effective dynamical averaging over radial dynamics as described in Ref. [2][3]. We define the local density n and spin polarization $\mathbf{m}$ by

$$\begin{aligned} n(x, t) &= \int dp f(x, p, t) \\ \mathbf{m}(x, t) &= \int dp \mathbf{M}(x, p, t) \end{aligned} \quad (1)$$

The local density of atoms in state 1, 2 is then given by $n_{1,2} = (n \mp m_{\parallel})/2$, defining $m_{\parallel}$ as the longitudinal component of the spin polarization. We also denote $g_{ij} = 4\pi\hbar^2 a_{ij}/m$ as the coupling constants associated to the different scattering lengths a_{ij} where i and $j = 1, 2$ ($a_{21} = a_{12}$ and m is the mass of the particles).

We now review the different terms entering the kinetic equation (for details, see Ref. [2]). The force acting similarly on both internal states contains three terms: the magnetic trap, the mean-field, and the Stern-Gerlach force (associated to a gradient of “effective external magnetic field” $\mathbf{\Omega}$, see below). The magnetic trap force is dominant, so the associated potential energy is given by

$$\frac{V_1(x) + V_2(x)}{2} = \frac{1}{2} m \omega_{ax}^2 x^2 \quad (2)$$

where V_1 and V_2 are the magnetic trapping potentials acting on states 1 and 2. The differential force can be described in the pseudo spin picture by an “effective external magnetic field” $\mathbf{\Omega}$ which contains two contributions: one due to the differential Zeeman effect and one due to the differential mean field, so that

$$\hbar\mathbf{\Omega}(x) = [V_2(x) - V_1(x) + (g_{22} - g_{11})n(x)/2]\mathbf{e}_{\parallel} \quad (3)$$

where $\mathbf{e}_{\parallel}$ is a unit vector in the longitudinal direction. Following Ref. [1], we have assumed that $2g_{12} \simeq g_{11} + g_{22}$ for simplicity. The average value over the sample of the “effective external magnetic field” is removed by going to a uniformly rotating frame (Larmor frame). It is also crucial to consider the ISRE which manifests itself as a “molecular field” or “spin mean field” $g_{12}\mathbf{m}(x, t)/2$, which adds to the “effective external magnetic field” (3). Finally, the collision integral is treated in a relaxation-time approximation with a time τ of the order of the average time between collisions. The kinetic equation is written as

$$\partial_t f + \frac{p}{m} \partial_x f - m\omega_{ax}^2 x \partial_p f \simeq -(f - f^{eq})/\tau \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{M} + \frac{p}{m} \partial_x \mathbf{M} - m\omega_{ax}^2 x \partial_p \mathbf{M} - (\mathbf{\Omega} + \frac{g_{12}\mathbf{m}}{2\hbar}) \times \mathbf{M} \\ \simeq -(\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq})/\tau \end{aligned} \quad (5)$$

where f^{eq} and $\mathbf{M}^{eq}$ are local equilibrium phase space densities.

In the hydrodynamic regime close to local equilibrium, the above equations reduce to the counterpart of the Leggett equations [11] in the case of a Boltzmann gas [6], namely

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{m} + \partial_x \mathbf{j} &= \mathbf{\Omega} \times \mathbf{m} \\ \partial_t \mathbf{j} - (\mathbf{\Omega} + \frac{g_{12}\mathbf{m}}{2\hbar}) \times \mathbf{j} + \frac{k_B T}{m} \partial_x \mathbf{m} + \omega_{ax}^2 x \mathbf{m} \\ &\simeq -\frac{\mathbf{j}}{\tau} \end{aligned} \quad (6)$$

where $\mathbf{j}(x, t)$ is the spin polarization current along Ox . These equations are also valid in the collisionless regime close to global equilibrium [11]. We define $\mu = g_{12}n(0)\tau/2\hbar$ as the dimensionless parameter which characterizes the strength of the ISRE and denote $D = k_B T \tau / m$ as the spin diffusion coefficient.

3 Castaing's instability

Studying polarized ^3He gas, Castaing [8] noticed that a sufficiently strong longitudinal spin polarization gradient is unstable against transverse long wavelength fluctuations. This result was obtained by analyzing a uniform gas ($\omega_{ax} = 0$) with a uniform precession frequency (so that $\mathbf{\Omega} = 0$ in the Larmor frame) and by assuming a time independent spin gradient. Using the Leggett equations (6), Castaing studied the stability of this system with respect to the transverse fluctuations. He assumed a small plane wave perturbation around a slightly non-uniform stationary solution such that

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(x, t) &= m_{\parallel}^0(x) \mathbf{e}_{\parallel} + \delta \mathbf{m} e^{i(kx - \omega t)} \\ \mathbf{j}(x, t) &= -D \partial_x m_{\parallel}^0(x) \mathbf{e}_{\parallel} + \delta \mathbf{j} e^{i(kx - \omega t)} \end{aligned} \quad (7)$$

For circularly polarized transverse spin waves in the presence of a strong gradient of longitudinal spin polarization, one obtains the following spectrum for the hydrodynamic regime ($\partial_t \mathbf{j} \simeq 0$)

$$\omega = \frac{D}{1 + (\mu m_{\parallel}^0/n)^2} \left(\mu m_{\parallel}^0/n - i \right) \left(k^2 - \mu k (\partial_x m_{\parallel}^0)/n \right) \quad (8)$$

Here, a mode with wave vector k is unstable if the mode frequency ω has a positive imaginary part ω_I , which leads to instability when

$$k^2 < \mu k (\partial_x m_{\parallel}^0)/n \quad (9)$$

The goal of this paper is to study Castaing's instability in a trapped ultra-cold gas. Using a numerical simulation, described in the next section, we show that an instability does occur. The situation we study is richer than the one considered in Castaing's original work in several aspects: (i) with the full kinetic equation (instead of Leggett equations) we can describe spin oscillations of large amplitude,

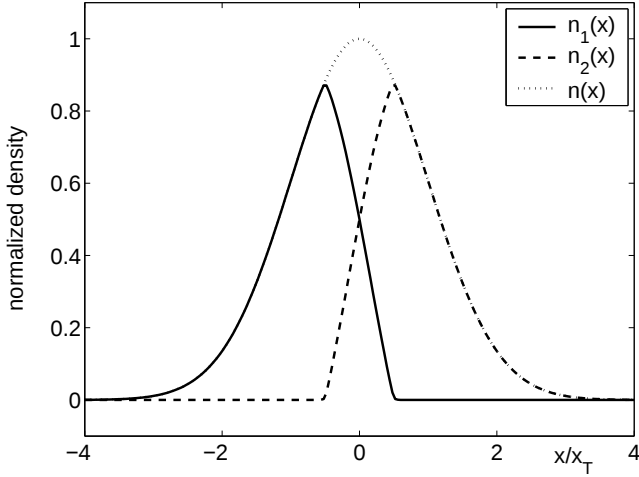


Fig. 1. Initial density of atoms in state 1 (solid line) and 2 (dashed line) giving a strong gradient of longitudinal spin polarization near the center of the trap ($\partial_x m_{\parallel}^0/n(0) = 2/x_T$). The total density is also plotted (dotted line).

(ii) we are not limited to the hydrodynamic regime (for example, regimes between hydrodynamic and collisionless are included), (iii) the longitudinal spin polarization gradient is not assumed to be constant, and (iv) we can also include a possible gradient of the precession frequency (i.e. the “effective external magnetic field” is position dependent).

4 Numerical simulation

The kinetic equation (4,5) is solved numerically by propagating in time the initial distribution in a discretized phase-space using the Lax-Wendroff method (see e.g. [12]). We assume that the density in phase space is initially at equilibrium $f = f^{eq} \propto \exp(-x^2/2x_T^2 - p^2/2p_T^2)$, with $x_T = \sqrt{k_B T / m \omega_{ax}^2}$ and $p_T = \sqrt{m k_B T}$. As the equilibrium distribution does not evolve in time under the action of (4), the local density is constant and we concentrate on the evolution of $\mathbf{M}$ described by the kinetic equation (5). The initial spin density distribution $\mathbf{M}$ is taken as the product of the Maxwell-Boltzmann equilibrium distribution along the longitudinal axis and a function which equals -1 to the left of the trap center ($x < -x_T$), $+1$ to the right ($x > x_T$) and has a constant positive slope through the center ($-x_T < x < x_T$). The resulting initial density of atoms in state 1 and 2 is shown in Figure 1. We introduce a small initial transverse perturbation in order to start the instability. Without loss of generality, the perturbation can be written as a plane wave (with spatial frequency of order $1/x_T$) multiplied by the Maxwell-Boltzmann equilibrium distribution and divided by a number $\mathcal{N} \gg 1$ (typically between 10^3 and 10^6):

$$M_{\perp,1}(x, p) = f^{eq}(x, p) \cos(\pi x/x_T)/\mathcal{N} \quad (10)$$

Parameters used in the simulation are taken from Ref. [1]. The axial trapping frequency is $\omega_{ax}/2\pi = 7$ Hz and

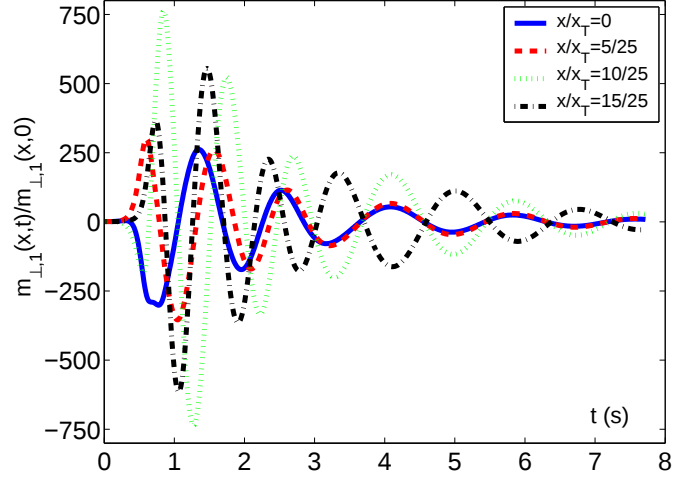


Fig. 2. Time evolution of the (normalized) transverse spin polarization $m_{\perp,1}(x, t)/m_{\perp,1}(x, 0)$ at different positions in the trap: $x/x_T = 0$ (solid line); $5/25$ (dashed line); $10/25$ (dotted line); $15/25$ (dashed-dotted line). For this simulation $\mu \simeq 22$, $\omega_{ax}\tau \simeq 0.6$, $\delta\Omega/\omega_{ax} = 2$, $\partial_x m_{\parallel}^0/n(0) = 2/x_T$ and $\mathcal{N} = 10^3$.

the time between collisions $\tau \sim 10$ ms, so that $\omega_{ax}\tau \sim 0.5$. The “effective external magnetic field” is taken to be an inverted Gaussian of depth $\delta\Omega$ ($|\delta\Omega|/\omega_{ax}$ is varied between 0 and 2) and half-width x_T . The density at the center of the trap is $n(0) = 1.8 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$. The initial spin polarization gradient near the center of the trap is varied and typically $|\partial_x m_{\parallel}|/n(0) \sim 2/x_T$. For ^{87}Rb atoms, with $a_{12} = 5.2 \times 10^{-9}$ m and $T = 0.6$ μK , the ISRE parameter is $\mu \sim 5$. With these parameters, an instability can already be observed in our simulations but is probably too weak to be detected experimentally. To enhance the effect, we take a scattering length 5 times smaller ($a_{12} \rightarrow a_{12}/5$) and an axial trap frequency 20 times smaller ($\omega_{ax} \rightarrow \omega_{ax}/20$), keeping a constant density at the center of the trap. We discuss these matters further in the next section.

As the phase space is modeled by a discrete grid with finite size, it is important to distinguish between a physical instability and a numerical one. This can be easily done as only the latter will depend on the grid spacing. One can always get rid of a numerical instability by choosing a sufficiently tight grid.

Results of the simulation are shown in Figures 2 and 3. The time evolution of the transverse spin polarization is plotted in Figure 2 for different positions near the center of the trap, where the longitudinal spin polarization gradient is most pronounced. The instability is clearly visible, owing to a large enhancement of the transverse spin polarization by a large factor comparable to $\mathcal{N}$. Figure 3 shows the logarithm of the time evolution of the (normalized) transverse spin polarization at the center of the trap. In this representation, one can clearly distinguish the exponential rise of the envelope (after a short delay of order of the time between collisions) and its subsequent exponential decay.

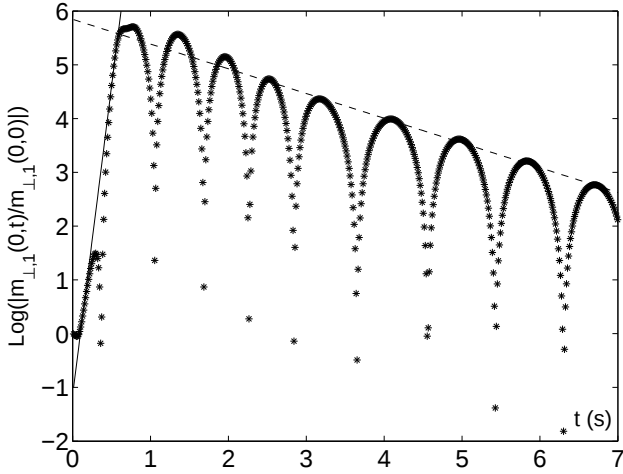


Fig. 3. Time evolution of the logarithm of the (normalized) transverse spin polarization $m_{\perp,1}(0,t)/m_{\perp,1}(0,0)$ at the center of the trap. The two lines are plotted to visualize the exponential rise of the instability (full line) and then the exponential decay of the spin wave (dashed line). The parameters have the same values than for the simulation of Fig. 2.

5 Discussion

The initial rise of the transverse spin polarization shows that an instability indeed occurs. As already stated, the results presented here were obtained for a scattering length a_{12} and trap frequency ω_{ax} that were smaller than in the current experiment at JILA [1] (by factors of 5 and 20 respectively). This was done to enhance the effect of the “spin mean-field” (to favor the instability) by increasing the ISRE parameter μ^1 . As will be seen below, we have to keep $\omega_{ax}\tau \lesssim 1$, which implies scaling the axial trap frequency with the square of the scattering length since $\tau^{-1} \propto a_{12}^2$. This procedure for enhancing the ISRE insures that the gas remains non-degenerate.

The phenomenon observed in Fig. 2 and 3 may be broken down into the following four steps:

I.) During a time of the order of the time between collisions $\tau \sim 250$ ms a hydrodynamic description is not valid (the spin polarization current, which is a fast variable, has not reached its stationary value yet). Figures 2 and 3 show that the transverse spin polarization does not evolve significantly.

II.) Then, as shown by the solid line in Figure 3, the envelope of the transverse spin polarization rises exponentially (the coefficient in the exponential ω_I is almost constant in time). This is a characteristic of an instability. The value of ω_I (as compared to the formula obtained by Castaing, see equation (8)) is modified by the presence of the trap. An estimate of the time needed for the instability to develop (see Ref. [9]) is given by $t_{inst} \sim L_m^2/D \simeq 1/\omega_{ax}^2\tau \sim 1$ s (where L_m is the char-

¹ This could be done experimentally by using a Feshbach resonance to decrease the scattering length, as $\mu \sim \lambda_T/a_{12}$ where λ_T is the de Broglie thermal wavelength.

acteristic size of the longitudinal spin polarization gradient; $L_m \simeq x_T$ in a typical simulation). It reproduces correctly the order of magnitude of the observed maximum of transverse spin polarization in the simulation. The instability can develop only if the spin polarization current has reached its stationary value, so that $\tau < t_{inst}$ which implies $\omega_{ax}\tau \lesssim 1$.

III.) The imaginary part of the frequency ω_I varies slowly in time because the gradient of longitudinal spin polarization is not constant but decays as a result of both spin diffusion and the presence of the trap. The change of sign of ω_I marks the end of the exponential grow. Once ω_I is negative, the transverse spin polarization decays as an ordinary damped spin wave.

IV.) The longitudinal spin polarization gradient finally decays on a time scale of the order of the diffusion time $t_{diff} \sim L^2/D \sim 4$ s where L is the size of the cloud ($L/x_T \sim 2$). As emphasized by Kuklov and Meyerovich [9], if $L > L_m$, the instability develops faster than the longitudinal spin polarization relaxes, in accordance with the results of our simulation. Once the longitudinal spin polarization is zero, ω_I ceases to evolve in time, and consequently the envelope of the transverse spin wave decreases exponentially (dashed line in Figure 3). This happens for $t \gtrsim t_{diff}$. The frequency of the spin wave is not completely determined by the real part of the mode frequency in equation (8), as the gradient of external precession frequency, $\partial\Omega$, and the presence of the trap are not taken into account. Actually, its order of magnitude (at the center of the trap) is given by the external precession frequency $\delta\Omega = 2\omega_{ax} \simeq 2\pi \times 0.7$ Hz. We have checked that when $\delta\Omega/\omega_{ax} = 0$, the transverse spin polarization at the center of the trap does not oscillate.

The criterion for an instability (see equation (9)) is qualitatively verified at the center of the trap if one takes into account the fact that wave vectors k are limited by the presence of the trap. This forces $k > 2\pi/L$ and the criterion becomes

$$\mu \frac{|\partial_x m_{\parallel}^0|}{n(0)} > \frac{2\pi}{L} \sim \frac{\pi}{x_T} \quad (11)$$

Using an initial longitudinal spin polarization gradient $\partial_x m_{\parallel}^0/n(0) = 2/x_T$ and $L \sim 2x_T$ implies that the ISRE parameter μ should be larger than ~ 2 . In the simulation, we found an instability threshold at $\mu \simeq 4$. Obtaining a significant instability requires a much larger value of the ISRE parameter.

We now discuss the relevance of this criterion for one of the experiments done at JILA (see the first article of Ref. [1]), where spatial separation of the two internal states was observed as a result of an initial $\pi/2$ rf pulse. The maximum longitudinal spin polarization occurred at the maximum of spin state separation and can be estimated as $|\partial_x m_{\parallel}|/n(0) \sim 1/x_T$ (at $x \sim \pm x_T/2$). Since the value of the ISRE parameter is $\mu \sim 5$, our numerically obtained criterion ($\mu |\partial_x m_{\parallel}^0|/n(0) \gtrsim 8/x_T$) predicts no instability. Whether it is experimentally feasible in practice to reach transient total (or nearly total) separation of the two spin

states, so that, when re-mixing, the longitudinal spin polarization gradient would be strong enough for Castaing's instability to develop, is not clear. A very strong initial gradient of longitudinal spin polarization with $\mu \sim 5$ may not be enough to start the instability because the spin diffusion is very efficient in decreasing a strong gradient. One would have to maintain a strong longitudinal spin polarization gradient in order to create an instability with the current experimental value of μ .

6 Conclusion

Our numerical simulation confirms the possibility of observing Castaing's instability in a trapped ultra-cold gas with two internal states, as proposed by Kuklov and Meyerovich [9]. We solved a one dimensional kinetic equation numerically, and were therefore able to include effects that are beyond the usual treatment of Castaing's instability in terms of a small amplitude hydrodynamic description. We argue that Castaing's instability was probably not relevant for the previous experiments done at JILA [1] as both the ISRE parameter μ and the longitudinal spin polarization gradient were too small. This does not preclude observation of the instability in future experiments if relevant parameters like the trapping frequency and the scattering length are chosen appropriately. We suggest the use of Castaing's instability as a way of creating spontaneous transverse spin waves as a result of a strong initial longitudinal spin polarization gradient. Our calculations are also valid for a non-degenerate gas of fermions (see Ref. [2]), where similar effects could be observed, in a case where $g_{11} = g_{22} = 0$ and the "spin mean-field" changes sign.

We are grateful to Franck Laloë for many useful discussions and to Chris Bidinosti for reading the manuscript. Le Laboratoire Kastler Brossel (LKB) est une Unité Mixte de Recherche du CNRS (UMR 8552), de l'ENS et de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris).

References

1. H.J. Lewandowski, D.M. Harber, D.L. Whitaker and E.A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **88**, (2002) 070403; J.M. McGuirk, H.J. Lewandowski, D.M. Harber, T. Nikuni, J.E. Williams and E.A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **89**, (2002) 090402.
2. J.N. Fuchs, D. Gangardt and F. Laloë, Phys. Rev. Lett. **88**, (2002) 230404.
3. M.Ö. Oktel and L. Levitov, Phys. Rev. Lett. **88**, (2002) 230403; J. Williams, T. Nikuni and C.W. Clark, Phys. Rev. Lett. **88**, (2002) 230405.
4. C. Lhuillier and F. Laloë, J. Physique **43**, (1982) 197.
5. E.P. Bashkin, JETP Lett. **33**, (1981) 8.
6. C. Lhuillier and F. Laloë, J. Physique **43**, (1982) 255.
7. B.R. Johnson, J.S. Denker, N. Bigelow, L.P. Lévy, J.H. Freed, and D.M. Lee, Phys. Rev. Lett. **52**, (1984) 1508; W.J. Gully and W.J. Mullin, Phys. Rev. Lett. **52**, (1984) 1810; G. Tastevin, P.J. Nacher, M. Leduc, F. Laloë, J. Phys. Lett. **46**, (1985) 249.
8. B. Castaing, Physica **126B**, (1984) 212.
9. A. Kuklov and A.E. Meyerovich, Phys. Rev. A **66**, (2002) 023607.
10. R.J. Ragan and D.M. Schwarz, J. Low Temp. Phys. **109**, (1997) 775; R.J. Ragan and R.W. Weber, J. Low Temp. Phys. **118**, (2000) 167.
11. A.J. Leggett, J. Phys. C **3**, (1970) 447.
12. W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky and W.T. Vetterling, *Numerical Recipes* (C.U.P., 1986), chapter 17.

Annexe D

Large amplitude spin waves in ultracold gases

Réf. [29]. A paraître dans Eur. Phys. J. D (arXiv :cond-mat/0304335).

Large amplitude spin waves in ultra-cold gases

J.N. Fuchs, D.M. Gangardt and F. Laloë
LKB, Département de Physique de l'ENS,
24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

May 29, 2003

Abstract

We discuss the theory of spin waves in non-degenerate ultra-cold gases, and compare various methods which can be used to obtain appropriate kinetic equations. We then study non-hydrodynamic situations, where the amplitude of spin waves is sufficiently large to bring the system far from local equilibrium. The full position and momentum dependence of the distribution function must then be retained.

In the first part of the article, we compare two general methods which can be used to derive a kinetic equation for a dilute gas of atoms (bosons or fermions) with two internal states (treated as a pseudo-spin $1/2$). The collisional methods are in the spirit of Boltzmann's original derivation of his kinetic equation where, at each point of space, the effects of all sorts of possible binary collisions are added. We discuss two different versions of collisional methods, the Yvon-Snider approach and the S matrix approach. The second method uses the notion of mean field, which modifies the drift term of the kinetic equation, in the line of the Landau theory of transport in quantum liquids. For a dilute cold gas, it turns out that all these derivations lead to the same drift terms in the transport equation, but differ in the precise expression of the collision integral and in higher order gradient terms.

In the second part of the article, the kinetic equation is applied to spin waves (or internal conversion) in trapped ultra-cold gases. Numerical simulations are used to illustrate the strongly non-hydrodynamic character of the spin waves recently observed with trapped ^{87}Rb atoms. The decay of the phenomenon, which takes place when the system relaxes back towards equilibrium, is also discussed, with a short comment on decoherence.

In two appendices we calculate the Wigner transform of the interaction term in the S matrix method, to first order in gradients; appendix I treats the case of spin-independent interactions, appendix II that of spin-dependent interactions.

1 Introduction

Recent experiments [1, 2] have renewed the interest in spin waves in dilute quantum gases, in conditions where they had not been observed before. A first novelty is that these waves were neither purely nuclear nor electronic, but involved two hyperfine atomic levels where the nuclear and electronic spin are coupled. This difference is actually minor: the exchange effects from which the waves originate are unaffected by the precise nature of the levels - in other words one can, without any loss of generality, assimilate any pair of atomic states to up and down states of a fictitious spin. The second, more important, difference is that the waves were observed with very large amplitudes, leading to an almost complete apparent segregation of

the atoms in each internal state, and involving situations where the gas is very far from local equilibrium; we study such situations in the present article.

In degenerate liquids, the existence of spin waves has been known for many years [3, 4]. In dilute gases, which are non-degenerate, it took about twenty more years [5, 6] to realize that they should also sustain similar waves, for both bosonic and fermionic systems. This came as a surprise to some since, before, these waves had been mostly associated with the Landau formalism for Fermi liquids, and with the notion of “molecular field” resulting from exchange and interactions with nearest neighbors. In a liquid, a test particle remains trapped in a sort of local cavity and interacts constantly with several neighbors, so that the notion of mean field emerges naturally from the averaging over the effect of several neighbors. By contrast, in a gas, the motion of a particle is often described as free flights along straight lines, interrupted by short collisional processes, so that the physics involved is clearly very different. It nevertheless turns out that, when averaged over all possible collisions at each point of space, the final result of the exchange interactions in a gas and a liquid are very similar (see, for example, Ref. [7] for a general discussion). Soon after these theoretical predictions, experimental observations demonstrated the existence of spin waves in spin polarized Hydrogen gas [8], ^3He gas [9], and dilute ^3He - ^4He solutions [10].

The physical difference between gases and liquids has its counterpart in the different theoretical approaches used to derive kinetic equations. Historically, the first derivation was that of Boltzmann, with his Stosszahlansatz (or molecular chaos Ansatz): collisions are considered as point processes (with no duration and no spatial extent) taking place between particles which are completely uncorrelated before collision. As a consequence, one can add at each point of space the effect of all possible binary collisions between uncorrelated particles, as if one was adding the effect of many “beam to beam collision experiments” in atomic physics. This provides the famous Boltzmann equation, with a relatively complicated collision term on the right hand side, while the drift term on the left hand side corresponds merely to a completely free flight of particles between collisions. In the approach introduced later by Landau for the study of degenerate Fermi liquids [11], quasi-particles are never free, since their motion is constantly guided by a mean field created by the neighbor particles. Therefore interactions modify the drift term while, on the other hand, the collision term is generally treated phenomenologically, by a simple relaxation approximation. Both point of view have their advantages. Boltzmann’s point of view does not require the use of a pseudo-potential and therefore allows a more microscopic treatment of collisions, for instance a more precise inclusion of lateral collisions including their full angular and energy dependence. On the other hand, it does not encompass quantum degenerate systems, does not introduce the powerful notion of quasi-particles, and generally speaking remains limited to dilute interacting gases.

The connection between the two points of view is provided by collisions in the forward direction. In two body collision theory, it is well known that wave interference in the forward direction is responsible for particle absorption (optical theorem). In addition, more physics may be involved in this forward interference effect: for spinless particles, retardation effects are introduced (see for instance [12]); for particles with spin, in addition, identical spin rotation effects (ISRE) due to particle indistinguishability [13, 6] also take place. In many-body transport theory, both these effects have their equivalents. The cumulated retardation effects during collisions give rise to an average force, or equivalently to a scalar mean field (see for instance [14] and references therein); in the kinetic equation, this corresponds to terms which are quadratic in the distribution function, as the collision term, but contain gradients (spatial gradients of the density as well as momentum gradients of the particle distribution); in other

words, one gets zero sound Landau type mean field terms which are naturally grouped with the drift term on the l.h.s. of the kinetic equation. As for the identical spin rotation effects, they average to a spin molecular field which is the equivalent of the molecular field considered by Silin [3] and Leggett [4]; the ISRE is already present to zero order gradient expansion, as opposed to the scalar retardation terms [13, 15], which explains why the dispersion relation of spin waves is different from the usual sound wave dispersion. A detailed study of forward scattering in a binary collision can therefore lead to a microscopic understanding of the origin of the Landau mean field (lateral scattering introduces collisional damping). From a practical point of view, it remains true that the mean field treatment of the drift term, necessarily associated with the use of a pseudo-potential, is often more compact and elegant than a detailed study of the collisional properties in the forward direction; it is nevertheless interesting to check precisely to what extent they are equivalent in various situations.

Our purpose in this article is twofold. First, for particles with spins, the equivalence in question has been verified in the literature only to zero order in the gradient expansion, in other words only for the local terms appearing in the kinetic equation. Here we wish to derive the kinetic equation to first (non-local) order in the gradient expansion. Moreover, we will consider the situation where the scattering may depend on the relative spin orientations (even if this dependence was relatively weak in the experiments of the JILA group [1, 2]). We will therefore examine in detail the properties of collisional interference in the forward direction in this more general case; the details of the calculations are given in two appendices (gradient expansion of the interaction term within the S -matrix collision Ansatz). Second, we also wish to study situation where the gas is far from local equilibrium. In fact, most of the work on spin waves in the literature deals with hydrodynamic situations where, at every point of space, the gas is close to local equilibrium, so that a simple hydrodynamic expression of the spin current can be used; of course, this reduces the number of variables, but at the price of an approximation which is not necessarily justified. In fact, in the experiments in question, the gas sometimes evolves very far from an hydrodynamic regime, which is not so surprising since the spin waves have a large amplitude and lead to an almost complete segregation of the two spin species. For a study of spin waves in the collisionless regime (mean-free-path large compared to characteristic lengths), but still close to equilibrium (linear regime), see Ref. [16].

2 Kinetic equation

We study an ensemble of identical atoms with two internal levels, obeying either Bose or Fermi statistics. As mentioned in the introduction we can, without any loss of generality, assimilate these two levels to two spin levels, whatever their real physical origin is. For instance, hyperfine atomic structure states, even in a situation of intermediate magnetic decoupling, are possible; the only important thing is that the quantum states describing the internal variables should be orthogonal. We now derive a kinetic equation for a dilute gas of such atoms.

2.1 Collisional methods; Yvon-Snider and Lhuillier-Laloë equations

In classical statistical mechanics, Boltzmann's intuitive method for deriving a kinetic equation is based on the study of individual collisions; one adds the effect of all possible binary collisions taking place at each point of space on the single particle distribution in phase-space $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Another point of view starts from the infinite hierarchy of BBGKY equations and closes its

first equation, which relates f_1 to the two particle distribution function f_2 , by studying the evolution of f_2 during a binary collision and expressing it as some functional of f_1 (see for instance Ref. [17, 18]).

The same lines can be followed in quantum mechanics, but $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ has to be replaced by the reduced single-particle density operator $\hat{\rho}_1$. Since we assume here that the particles have two internal states, which we treat as spin states, the single-particle density operator $\hat{\rho}_1$ acts in the product space of orbital and spin variables of one particle. The operatorial kinetic equation has the form:

$$\frac{d\hat{\rho}_1}{dt} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_1, \hat{H}_1]_- \simeq \left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}_1 \quad (1)$$

where:

$$\hat{H}_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{1} + \hat{V}^{ext} \quad (2)$$

is the single-particle Hamiltonian, $\mathbf{p}$ the momentum of the particle, m its mass, $\hat{1}$ the unity operator in spin space and $\hat{V}^{ext}$ the operator describing the external forces acting on the particle, which may be spin dependent. The r.h.s. of eq. (1) takes into account the effects of binary interactions between the particles; it contains the result of the collisional approximation mentioned above, and will be discussed in more detail below. The equation is only valid for a dilute gas ($n^{-1/3} \gg a$, where n is the number density of the gas and a the scattering length) and on time/length scales much greater than the duration of a collision/scattering length.

The next step is to introduce the Wigner transform [19, 20] $\hat{\rho}_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ of $\hat{\rho}_1$ with respect to orbital variables:

$$\hat{\rho}_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3\mathbf{r}' e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'/\hbar} \langle \mathbf{r} - \frac{\mathbf{r}'}{2} | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} + \frac{\mathbf{r}'}{2} \rangle \quad (3)$$

It is a classical function of position and momentum, but still an operator - or a 2×2 matrix - in spin space. In the following, we will treat the orbital degrees of freedom semi-classically, but not the spin degrees of freedom. For the sake of simplicity, from now on we will drop the index W , assuming that the dependence on $\mathbf{r}$ and $\mathbf{p}$ is sufficient to signal a Wigner distribution. One then performs a Wigner transform of equation (1), which involves taking the Wigner transform of products of operators. This is possible by using Groenewold's formula [21, 20], which provides the result as a infinite series of gradient expansion: the first term is merely the product of the Wigner transforms of the two operators, followed by product of gradients with respect to $\mathbf{r}$ and $\mathbf{p}$, followed by higher order gradients, etc. The Wigner transform of the l.h.s. of equation (1) then gives:

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \hat{V}^{ext}(\mathbf{r})]_- \\ - \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{V}^{ext}(\mathbf{r})]_+ + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

The first two terms are exact, whereas the next two are only the first orders terms in a gradient expansion involving the external potential. The commutator is obtained to zero order of the gradient expansion while the anticommutator occurs only to first order, followed by higher order terms symbolized by the dots. The anticommutator corresponds to the classical force term (describing the effect of a trap, for example), which we wish to retain in our calculations; as a consequence, we have to include up to first order gradient expansion in the Wigner transform of the r.h.s. of equation (1).

The non-trivial part in the derivation of a kinetic equation begins when one gives a precise expression to the formal r.h.s. of equation (1). This is the subject of many studies in the literature and even the subject of books; here, we limit ourselves to a simplified discussion of two different approaches which are appropriate for the study of spin waves. We consider only collisions taking place in elastic channels, where the number of atoms in each internal spin state is conserved, and begin with some simple considerations on elementary collision theory. For each channel, at very low temperatures, collisions occur in the extreme quantum regime where the typical s -wave scattering length a is small compared to the de Broglie thermal wavelength λ_T . In this case, collisions are well described by the isotropic s -wave, and the T matrix can be approximated by:

$$T_k(\hat{k}, \hat{k}') = -\frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} f_k(\theta) = \frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} (a - ika^2 + \dots) \quad (5)$$

(terms of order a^2 should be retained in order to satisfy explicitly the unitarity of the S -matrix in the optical theorem); in this equation, m is the mass of the particles, $f_k(\theta)$ the scattering amplitude which, for s -wave scattering, is independent of the polar angle θ , and k the collision wave vector.

A first obvious remark is that the intensity of the spherical scattered wave is proportional to the square of a , while interference effects in the forward direction between the incoming plane wave and the spherical scattered wave are proportional to a itself. Generally speaking, the relative magnitude of forward and lateral scattering effects is of order λ_T/a , which is large at low energies. This is why, here, we concentrate on forward scattering effects and their relation to mean field corrections to the drift terms. Another remark is that, because waves interfere only if they are in phase, phases and i factors are important here. It turns out that, in quantum mechanics as well as in optics [22, 23], the summation over many scatterers in the forward direction introduces an additional i factor (which is actually the origin of the i factor in the optical theorem). Hence, in every scattering channel, equation (5) shows that no first order a interference effect occurs in the forward direction, the first contribution arising from the second term in ika^2 ; to first order in a , only the phase of the forward wave is changed, not its intensity. But, if several scattering channels are open, the situation is different, because these different phase shifts in the forward scattered waves can introduce spin rotation. Actually, this is precisely the origin of the first order identical spin rotation effect in the forward direction [13, 6].

2.1.1 Spin-independent interactions

We now briefly summarize two approaches that have been developed in the context of particles with spin: the Yvon-Snider approximation, which emphasizes more the relation to the BBGKY hierarchy, and closes the infinite set of equations with an approximation suitable for a binary collision; the Lhuillier-Laloë (or S matrix) approach, which is closer to the initial approach of Boltzmann and makes use of the S collision matrix. We begin with the simplest case, when the interactions are independent of spin.

Yvon-Snider An interesting method is that originally proposed by Yvon [24], then independently by Snider [25]; it provides a result which, in the literature, is often called the Waldmann-Snider equation; the main idea is to express the collision term as the trace over a collision partner (particle 2) of a commutator containing the binary interaction potential V_{12}

and a product of single particle operators modified by the unitary transformation associated with the Møller collision operator $\Omega \equiv \Omega^{(+)}$:

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}_1(1) = (i\hbar)^{-1} Tr_2 \left\{ \left[V_{12}, \Omega \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \Omega^\dagger \right]_- \right\} \quad (6)$$

This equation is valid for dilute gases of distinguishable particles; for non-degenerate gases ($n\lambda_T^3 \ll 1$, where λ_T is the thermal wavelength of the particles) of bosons or fermions, it generalizes into:

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}_1(1) = (i\hbar)^{-1} Tr_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \left[V_{12}, \Omega \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \Omega^\dagger \right]_- \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} \quad (7)$$

where $\hat{P}_{ex.}$ is the exchange operator between particles 1 and 2, and where:

$$\epsilon = 1 \text{ for bosons, } \epsilon = -1 \text{ for fermions} \quad (8)$$

Wigner transforms can then be applied to these expressions to complete the derivation of the closed kinetic equation for $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. For instance, expanding (6) in a Groenewold gradient expansion of the products provides, to zero order in gradients, the straightforward Boltzmann expression for the collision term:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = & - \int d^3q \frac{q}{m} \left[\sigma_T(k) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \right. \\ & \left. - \int d^2\hat{k}' \sigma_k(\theta) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2) \right] \end{aligned} \quad (9)$$

where $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ is the spin trace of $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \text{Tr}_S \{ \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \} \quad (10)$$

and where $\hat{k}$ is the unit vector in the direction of $\mathbf{k}$ and θ the angle between $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}'$. Here we use the usual notation in Boltzmann theory:

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= 2\hbar\mathbf{k} & \mathbf{p}_2 &= \mathbf{p}_1 - \mathbf{q} \\ \mathbf{p}'_1 &= \mathbf{p} - (\mathbf{q}/2) + \hbar k \hat{k}' & \mathbf{p}'_2 &= \mathbf{p} - (\mathbf{q}/2) - \hbar k \hat{k}' \end{aligned} \quad (11)$$

as well as the definition of the differential and total cross sections:

$$\sigma_k(\theta) = (4\pi^4 m^2 / \hbar^4) |T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2; \quad \sigma_T(k) = \int d^2\hat{k}' \sigma_k(\theta) \quad (12)$$

Higher order terms will introduce scalar mean field terms, which we do not write here explicitly for concision; they can be found in the appendix of ref. [14].

Now, if we introduce spin and statistics, we have to use (7) instead of (6). To zero order in gradients, this introduces the additional exchange terms to the right hand side of (9):

$$\begin{aligned} & - \frac{\epsilon}{2} \int d^3q \frac{q}{m} \left\{ i\tau_{fwd.}^{ex.}(k) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_- \right. \\ & \quad \left. - \int d^2\hat{k}' i\tau_k^{ex.}(\theta) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2)]_- + \right. \\ & \quad \left. + \int d^2\hat{k}' \sigma_k^{ex.}(\theta) ([\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_+ - [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2)]_+) \right\} \end{aligned} \quad (13)$$

where the “generalized cross sections” are defined by:

$$\tau_{fwd.}^{ex.}(k) = (-8\pi^3 m / \hbar^2 k) \operatorname{Re} \{T(-\mathbf{k}, \mathbf{k})\} \quad (14)$$

and:

$$\sigma_k^{ex.}(\theta) - i\tau_k^{ex.}(\theta) = (4\pi^4 m^2 / \hbar^4) T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') T^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (15)$$

In (13), the two terms in the first two lines correspond respectively to the ISRE in the forward and lateral direction; the two terms in the third line correspond to exchange effects changing the values of the total and lateral cross sections, as discussed in more detail in [13]. For simplicity, we do not write the first order gradient terms, but more details on the limit of validity of the Yvon-Snider equation and of the various terms which it contains can be found in [26], [15] or [14] (in particular the Appendix of this last reference). Inserting the low energy limit (5) is trivial; we write the explicit results in the next section.

Lhuillier-Laloë Another point of view, more directly in the spirit of the initial Ansatz of Boltzmann, was employed by Lhuillier and Laloë (LL) [13]; it is based on the use of the S collision matrix. When collisions are treated only as “closed processes” (one ignores particles “in the middle of a collision”), it is indeed possible to use the S matrix to relate exactly the single particle operators after and before collision. One gets the following expression for the single particle density operator after collision $\hat{\rho}'_1$ as a function of the same operator $\hat{\rho}_1$ before collision:

$$\hat{\rho}'_1(1) = Tr_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \hat{S} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{S}^\dagger \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} \quad (16)$$

(the trace acts over orbital and spin variables of the collision partner 2) where the S matrix is related to the collision T matrix by:

$$\langle 1 : \mathbf{k}_f; 2 : -\mathbf{k}_f | \hat{S} | 1 : \mathbf{k}_i; 2 : -\mathbf{k}_i \rangle = \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) - i \frac{\pi m}{\hbar^2 k_i} \delta(k_f - k_i) T_{k_i} \quad (17)$$

($\hbar k$ is the relative momentum of the two particles). One then approximates the rate of change of $\hat{\rho}_1$ by the variation $(\hat{\rho}'_1 - \hat{\rho}_1)/\Delta t$ during a short time interval ¹ Δt , which is however much longer than the duration of a collision, to obtain:

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{coll} \hat{\rho}_1(1) \simeq \frac{1}{\Delta t} Tr_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \left[\hat{S} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{S}^\dagger - \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \right] \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} \quad (18)$$

One should note that the S matrix Ansatz of equation (18) is only valid for a non-degenerate gas where:

$$Tr_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} = \hat{\rho}_1(1) + \epsilon \hat{\rho}_1(1)^2 \simeq \hat{\rho}_1(1) \quad (19)$$

As above, the kinetic equation is obtained from equation (18) by performing a Wigner transform followed by a gradient expansion. In Appendix I we first calculate the zero order gradient expansion, which is given by equation (76) ; it is easy to see that it coincides exactly

¹We will see that Δt is a time which emerges naturally from the calculation through the occurrence of square of delta functions of the energy (see Appendix I).

with the sum of (9) and (13), which shows that the Yvon-Snider and S matrix approximations are exactly equivalent to this order. The first order gradient terms are also given in the same Appendix; here, we only give their low energy limit by using equation (5), which provides the following kinetic equation:

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) + \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{V}^{ext}(\mathbf{r}_1) + \epsilon g \hat{n}(\mathbf{r}_1) \right]_- \\ - \frac{1}{2} \left[\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (\hat{V}^{ext}(\mathbf{r}_1) + g n(\mathbf{r}_1) \hat{1} + \epsilon g \hat{n}(\mathbf{r}_1)) \right]_+ = I_{coll}[\hat{\rho}] \end{aligned} \quad (20)$$

where $g \equiv 4\pi\hbar^2 a/m$ and $\hat{n}(\mathbf{r}_1)$ is the local density operator integrated over velocities:

$$\hat{n}(\mathbf{r}) \equiv \int d^3p \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (21)$$

In this equation, as usual, forward scattering terms linear in the coupling constant $g \propto a$ have been included in the l.h.s. The local term of the collision integral, which regroups terms proportional to a^2 , is given by:

$$\begin{aligned} I_{coll}[\hat{\rho}] = - \int d^3q \frac{q}{m} \int d^2\hat{k}' a^2 \left(\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) - \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2) \right. \\ \left. + \frac{\epsilon}{2} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_+ - \frac{\epsilon}{2} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}'_2)]_+ \right) \end{aligned} \quad (22)$$

where $\mathbf{p}_2$, $\mathbf{p}'_1$ and $\mathbf{p}'_2$ are defined in (11). In addition to the anticommutator in the l.h.s. of (20), obtained to first order in the gradient expansion, we recover exactly the low-energy limit of the LL equation [13] with, in the l.h.s., the ISRE in the forward direction (the ISRE in the lateral directions disappears in the low energy limit); the second line of (22) provides the statistical terms introduced by particle indistinguishability into the total and differential collision cross section.

2.1.2 Spin-dependent interactions

We now study the gas with spin-dependent interactions and, for a moment, consider the particles as distinguishable. In the limit of slow elastic collisions, we need only consider four s -wave scattering lengths: a_{11} , a_{22} , $a_{12}^{(d)}$ and $a_{12}^{(t)}$. The two first describe collisions processes between particles that are in the same internal state; when they are in orthogonal internal states, two different processes occur for distinguishable particles: a direct collision process without energy transfer described by $a_{12}^{(d)}$, and a transfer collision process described by $a_{12}^{(t)}$ - similar processes occur in the theory of spin exchange collisions [27]. The T matrix is now a 4×4 matrix in spin space; to lowest order in the scattering lengths, its matrix elements with distinguishable particles are given by:

$$\langle 1 : \alpha ; 2 : \beta | \hat{T}_k | 1 : \gamma ; 2 : \delta \rangle = \frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11}(k) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{a}_{22}(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{a}_{12}^{(d)}(k) & \tilde{a}_{12}^{(t)}(k) \\ 0 & 0 & \tilde{a}_{12}^{(t)}(k) & \tilde{a}_{12}^{(d)}(k) \end{pmatrix} \quad (23)$$

where α , β , γ and δ are the internal state indexes taking values $\{1, 2\}$ and where:

$$\tilde{a}_{\alpha\beta}(k) = a_{\alpha\beta} [1 - ika_{\alpha\beta}] \quad (24)$$

Equation (23) replaces (5) when the interactions depend on spin.

Kinetic equation The derivation of the kinetic equation then proceeds along the same lines as in the previous section: we use (16) again to symmetrize the density operator and take quantum statistics into account, but now insert (23) instead of (17) in it, calculate the partial trace, and obtain an interaction term for the single particle density operator; we then Wigner transform the result and use a gradient expansion limited to first order. This calculation is similar to that of Appendix I for spin-independent interactions, but of course more complicated; it provides more general expressions for the mean field terms and the collision integrals. For conciseness, we limit ourselves to the mean field terms, which will actually be sufficient for our calculations below. In this particular case, the terms can actually be obtained more conveniently by an operatorial method, different from that of Appendix I, as shown in Appendix II. We only reproduce the final kinetic equation:

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \hat{U}(\mathbf{r})]_- \\ - \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{U}(\mathbf{r})]_+ = I_{coll}[\hat{\rho}] \end{aligned} \quad (25)$$

where the effective single-particle potential $\hat{U}$ is:

$$\hat{U} = \hat{V}^{ext} + \begin{pmatrix} (1 + \epsilon)g_{22}n_2 + g_{12}n_1 & \epsilon g_{12}n_{21} \\ \epsilon g_{12}n_{12} & (1 + \epsilon)g_{11}n_1 + g_{12}n_2 \end{pmatrix} \quad (26)$$

with $g_{\alpha\beta} \equiv 4\pi\hbar^2 a_{\alpha\beta}/m$, where $a_{12} \equiv a_{12}^{(d)} + \epsilon a_{12}^{(t)}$; it turns out that only this combination of the direct and transfer coupling constants enters the calculation (for more details, see Appendix II).

This kinetic equation resembles the Landau-Silin equation [3, 28] for a normal Fermi liquid in a magnetic field. The second term in the l.h.s. of (25) is the usual free drift term; the anticommutator is a force term including both the effect of an external potential and of the mean field; the commutator is a spin precession term containing effective magnetic fields from different origins (differential Zeeman effect, spin mean field, etc.).

Evolution of the density and spin density in phase space The structure of the distribution function, which is still a matrix in the space of internal variables, is more explicit if we decompose $\hat{\rho}$ and $\hat{U}$ in the basis formed by Pauli matrices $\hat{\sigma}$ and the unit 2×2 matrix:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= \frac{1}{2} (f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \hat{1} + \mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \hat{\sigma}) \\ \hat{U}(\mathbf{r}, t) &= U_0(\mathbf{r}, t) \hat{1} + \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\sigma} \end{aligned} \quad (27)$$

When written in terms of the phase-space density f and spin density $\mathbf{M}$, equation (25) becomes:

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} &= I_{coll}^{(f)}[f, \mathbf{M}] \\ \partial_t \mathbf{M} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \frac{2\mathbf{U}}{\hbar} \times \mathbf{M} &= I_{coll}^{(M)}[f, \mathbf{M}] \end{aligned} \quad (28)$$

In these equations, U_0 plays the role of the overall trapping potential and $\mathbf{U}$ is the local effective magnetic field around which the spins rotate. The effective trapping potential U_0 is

given by:

$$U_0(\mathbf{r}, t) = \frac{V_2^{ext} + V_1^{ext}}{2} + \left[\frac{1 + \epsilon}{2}(g_{22} + g_{11}) + g_{12} \right] \frac{n}{2} + \frac{1 + \epsilon}{2}(g_{22} - g_{11}) \frac{m_{\parallel}}{2} \quad (29)$$

and the effective magnetic field is:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar\Omega(x, t)}{2} \mathbf{e}_{\parallel} + \epsilon \frac{g_{12}\mathbf{m}(x, t)}{2} \\ \hbar\Omega(\mathbf{r}, t) &= V_2^{ext} - V_1^{ext} + \frac{1 + \epsilon}{2} [(g_{22} - g_{11})n + (g_{22} + g_{11} - 2g_{12})m_{\parallel}] \end{aligned} \quad (30)$$

where the local density and spin polarization density are defined as:

$$\begin{aligned} n &= n_2 + n_1; \quad m_{\parallel} = n_2 - n_1 \\ m_{\perp,1} &= n_{21} + n_{12}; \quad m_{\perp,2} = i(n_{21} - n_{12}) \end{aligned} \quad (31)$$

The basis in spin space is denoted by $\{e_{\perp,1}; e_{\perp,2}; e_{\parallel}\}$. The two first vectors define the transverse plane, the last defines the longitudinal direction.

The collision integral in (25), i.e. the equivalent of eq. (22) when the interactions are spin-dependent, is not written explicitly; to simplify the calculations, and because we will mostly study experimental situations where lateral collisions do not play a dominant role, we limit ourselves to a simple relaxation time approximation:

$$I_{coll}^{(f)} \simeq -\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\tau}; \quad I_{coll}^{(M)} \simeq -\frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \mathbf{M}^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\tau} \quad (32)$$

where f^{eq} (resp. $\mathbf{M}^{eq}$) is the local equilibrium (spin) density in phase-space, and τ is a relaxation time. Actually, one could allow for different relaxation times for f , $\mathbf{M}_{\parallel}$ and $\mathbf{M}_{\perp}$. Nevertheless, in the case of a non-degenerate gas with spin-independent interactions, it is known (Ref. [29] and references therein) that these relaxation times are equal; below we consider a non-degenerate gas of ^{87}Rb , for which the three scattering lengths a_{11} , a_{22} and a_{12} are very close [1], so that in practice we will only need a single relaxation time τ given approximately by:

$$\tau \simeq \frac{1}{4\pi a_{12}^2 n} \sqrt{\frac{m}{k_B T}} \quad (33)$$

Finally, the kinetic equations we will use below to discuss spin waves are:

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} &\simeq -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \\ \partial_t \mathbf{M} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} U_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{M} - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f - \frac{2\mathbf{U}}{\hbar} \times \mathbf{M} &\simeq -\frac{\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq}}{\tau} \end{aligned} \quad (34)$$

The main differences with the LL kinetic equation derived in Ref. [13] are that the full mean field is included (not just the spin mean field), and that the equation is obtained for general spin-dependent interactions. Nevertheless, our result is also less general, since the collisions are assumed to occur only in the s -wave channel and that the collision integral is treated at the relaxation time approximation level (if necessary, these two restrictions could be lifted without any special difficulty).

2.2 Mean field

Another way to derive the modified drift term is to directly use a mean field approximation within field theory. The following second quantized Hamiltonian density is used to describe a trapped ultra-cold gas of bosons or fermions:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_{int} \\ &= \sum_{\alpha=1,2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) + V_{\alpha}^{ext}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha\beta} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r})\end{aligned}\tag{35}$$

The annihilation and creation field operators of a particle in the internal state α are $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$ and $\psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r})$. They have bosonic or fermionic equal-time commutation or anticommutation relations. The interactions only depend on the three coupling constants g_{11} , g_{12} and g_{22} ; the real potential V -matrix elements have been replaced by the appropriate T -matrix elements at low-energy, according to an usual procedure in the study of cold gases (Fermi pseudo-potential method [30], or $V \rightarrow T$ renormalization procedure in Ref. [28]).

We wish to obtain the time evolution of the single-particle density matrix $\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) \rangle$, where $\langle \dots \rangle$ denotes the expectation value with respect to the time-dependent N -body density operator of the system. To this end we write down the Heisenberg equation of motion for $\psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \psi_{\beta}(\mathbf{r}, t)$ using the Hamiltonian (35). The non-interacting part of the Hamiltonian density $\mathcal{H}_1$ gives the single-particle Liouville-von Neumann equation:

$$\begin{aligned}i\hbar \partial_t \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \nabla_{\mathbf{r}'}^2) \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \\ &\quad + (V_{\alpha}^{ext}(\mathbf{r}) - V_{\beta}^{ext}(\mathbf{r}')) \rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)\end{aligned}\tag{36}$$

The interacting part $\mathcal{H}_{int}$ couples the single-particle density matrix with the expectation value of the product of four field operators (two-particle density matrix). If we are only interested in time scales large compared to the duration of a collision, we can decompose the averages of such products into averages of products of two operators². In the context of the equation of motion for the single-particle density matrix, this approximation is often called the random phase approximation (RPA) [31]. The interacting part of the equation of motion then becomes:

$$\sum_{\delta=1,2} V_{\alpha\delta}^{mf}(\mathbf{r}, t) \rho_{\delta\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) - \sum_{\delta=1,2} \rho_{\alpha\delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) V_{\delta\beta}^{mf}(\mathbf{r}', t)\tag{37}$$

where the mean field potential 2×2 matrix is given by:

$$V_{\alpha\beta}^{mf}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha,\beta} \sum_{\gamma=1,2} g_{\alpha\gamma} \langle \psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}) \rangle + \epsilon g_{\alpha\beta} \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r}) \rangle\tag{38}$$

which contains a direct term and an exchange mean field term, proportional to ϵ . Within this approximation, each particle evolves under the influence of an effective single-particle

²This result can be obtained for instance from the Wick theorem. It is valid because the gas is not Bose condensed; otherwise, the mean field could not be obtained in that way, due to the absence of the exchange term.

potential $\hat{U}(\mathbf{r}, t)$, which is the sum of the external potential $\hat{V}^{ext}(\mathbf{r})$ and the time-dependent mean field $\hat{V}^{mf}(\mathbf{r}, t)$.

In order to compare this result with that of the preceding section, we note that $n_\alpha(\mathbf{r}, t) = \langle \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi_\alpha(\mathbf{r}, t) \rangle$ is the average density of atoms in internal state $\alpha = 1, 2$ and the off-diagonal elements $n_{12}(\mathbf{r}, t) = n_{21}^*(\mathbf{r}, t) = \langle \psi_1^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi_2(\mathbf{r}, t) \rangle$ are the coherences between the internal states, so that the effective potential $\hat{U}$ reproduces exactly the one obtained in the preceding section, equation (26). We therefore arrive at the following operatorial kinetic equation:

$$\frac{d\hat{\rho}_1}{dt} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_1, \hat{H}_1 + \hat{V}^{mf}]_- = 0 \quad (39)$$

which is the quantum equivalent of the Vlasov equation (see Ref. [18] for example); in this equation, $\hat{H}_1$ is the single particle hamiltonian defined in (2) and $\hat{V}^{mf}$ is defined by (38). Obviously, if we Wigner transform this operatorial equation, we will obtain a kinetic equation that is equivalent to (25), but without the collision integral. The effect of lateral collisions can then be treated phenomenologically by adding by hand a term corresponding to a relaxation time approximation, as usual [31]; then equations (34) are recovered and the mean field treatment of interactions becomes exactly equivalent to these simplified equations.

2.3 Discussion

We have used three different methods to derive a kinetic equation for a gas of atoms with two internal levels: the S matrix (or LL) Ansatz, the Yvon-Snyder Ansatz (YS) and the mean field approximation; we now summarize a comparison between the results.

To zero order in the gradients, LL and YS give exactly the same equation, containing a Boltzmann-type collision integral and a spin mean field. As for the mean field approximation, it provides only the spin mean field, obtained in the limit of low-energy collisions because of the use of the pseudopotential; this limit is in full agreement with the results of the two other methods. We note in passing that this spin mean field occurs for a non-condensed Bose gas, but not in a Bose-Einstein condensate (BEC) at very low temperature, because the exchange term is absent when a single quantum state is involved. In this case, there is however a different mechanism for creating spin waves, the so-called “quantum torque” of purely kinetic origin [32]; it arises naturally because, in quantum mechanics, any gradient of the phase corresponds to a kinetic energy for each component which, in turn, affects the evolution of the relative phase and therefore of the transverse spin orientation.

To first order in the gradients and for forward scattering, LL, YS and the mean field approximation all give the same scalar mean field term (zero sound), again in the limit of low-energy collisions for the third method. We have checked that the complete expression of the LL and YS first order gradient terms coincide exactly for forward scattering, but not for lateral scattering; whether or not the two methods are completely equivalent to this order is left as an open question; for more details see [33].

In a non-degenerate dilute gas, the spin mean field generally dominates over the scalar mean field, because it appears to lower order in the gradient expansion; it is therefore not surprising that zero sound type collective modes should not propagate as easily as spin waves in dilute non-degenerate gases.

To what extent collisional methods and mean field approximations are equivalent is not a trivial question. Generally speaking, mean field theory is assumed to be valid for systems with either long range interactions (Vlasov’s equation for a plasma [18]) or in strongly interacting

degenerate systems described in terms of quasi-particles (Landau's equation for a Fermi liquid [11, 3, 28]); for a dilute gas, neither of these conditions is met. Our conclusion is nevertheless that the equivalence is perfect to first order in the scattering length a but does not hold to higher orders in a . We finally remark that, when describing a non-degenerate dilute atomic gas in terms of quasi-particles (see the work of Bashkin [16], for example), a quasi-particle is just a particle whose kinetic energy $p^2/2m$ is shifted by a local mean field term, so that the kinetic drift term of the quasi-particle transport equation is left unchanged.

3 Spin oscillations and internal conversion

Our purpose now is to use the kinetic equation obtained in the preceding section to discuss spin waves in ultra-cold trapped atomic gases. We first briefly review a recent experiment realized at JILA [1] and the theoretical work stimulated by it [34, 35, 36, 37, 38]. We then discuss the non-hydrodynamic character of the observed spin waves, which allows a comparison between the different theoretical treatments. Finally, we describe the decay of the spin waves and discuss the relevance of decoherence.

3.1 The JILA experiment

In a recent experiment performed at JILA, Lewandowsky *et al* have studied bosonic ^{87}Rb atoms with two hyperfine states of interest (denoted by 1 and 2), confined in an axially symmetric magnetic trap elongated along the Ox direction. Their experiment is described in [1]; the temperature T of the gas in this experiment is about twice the critical temperature for Bose-Einstein condensation, so that the gas is not strongly degenerate and can be treated reasonably well as a Boltzmann gas; however, since the de Broglie thermal wavelength is much larger than the average scattering length, collisions occur in the full quantum regime. Initially, the gas is at equilibrium with only state 1 populated. A $\pi/2$ radio frequency pulse is then applied, which suddenly puts all the atoms into the same coherent superposition of states 1 and 2. The subsequent evolution of the system along the axial direction is then monitored by measuring optically the local densities n_1 and n_2 of atoms in each internal state. Experimentally, one observes that the system "segregates": after about 100 ms, atoms in state 1 are mostly found away from the center of the trap, while atoms in state 2 move towards the center, the total density $n = n_1 + n_2$ remaining practically unchanged. After about 200 ms, the local densities of each species return to equilibrium.

In Ref. [35], this phenomenon was explained in terms of an internal conversion resulting from the identical spin rotation effect (ISRE), which is at the origin of the spin mean field; similar considerations were almost simultaneously provided by two other groups [34, 36]. Qualitatively, this spin oscillation can be understood as follows:

- (i) the field gradient creates an inhomogeneous spin precession, so that the gas develops a gradient of transverse spin polarization
- (ii) the thermal motion of the atoms then creates correlations between transverse spin and velocity; therefore, a particle moving with a given velocity at point x gets a spin polarization which is not parallel to the average local polarization
- (iii) the ISRE then makes its spin polarization leave the transverse plane and get a longitudinal component, in a direction which depends on the sign of the velocity
- (iv) this is equivalent to a velocity dependent internal conversion which, at some later time, results in an efficient spatial separation of atoms in the two internal states.

To study this phenomenon quantitatively, we derive from (34) an effective one-dimensional kinetic equation in terms of the local density in phase space $f(x, p, t)$ and spin density $\mathbf{M}(x, p, t)$, by assuming that radial equilibrium is quickly established (the radial trap frequency $\omega_{rad}/2\pi$ is much larger than the axial trap frequency $\omega_{ax}/2\pi$). Integrating (34) over radial coordinates y, z and momenta p_y, p_z provides the following equations:

$$\partial_t f + \frac{p}{m} \partial_x f - \partial_x U_0 \partial_p f - \partial_x \mathbf{U} \cdot \partial_p \mathbf{M} \simeq -(f - f^{eq})/\tau \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{M} + \frac{p}{m} \partial_x \mathbf{M} - \partial_x U_0 \partial_p \mathbf{M} - \partial_x \mathbf{U} \partial_p f - \frac{2\mathbf{U}}{\hbar} \times \mathbf{M} \\ \simeq -(\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq})/\tau \end{aligned} \quad (41)$$

(every quantity depending initially on three-dimensional coordinates $\mathbf{r}$ and momenta $\mathbf{p}$ has been integrated over radial coordinates and momenta, so that it now depends only on the coordinate x and the momentum $p \equiv p_x$). In the process of radial averaging, the coupling constants $g_{\alpha\beta}$ are renormalized by a factor $1/2$, as discussed by Levitov [34]. The three-dimensional effective trapping potential (29) therefore becomes:

$$\begin{aligned} U_0(x, t) = \frac{V_2^{ext} + V_1^{ext}}{2} + \left[\frac{1 + \epsilon}{2} (g_{22} + g_{11}) + g_{12} \right] \frac{n}{4} \\ + \frac{1 + \epsilon}{2} (g_{22} - g_{11}) \frac{m_{\parallel}}{4} \end{aligned} \quad (42)$$

and the three-dimensional effective magnetic field (30) is changed into:

$$\mathbf{U}(x, t) = \frac{\hbar \Omega(x, t)}{2} \mathbf{e}_{\parallel} + \epsilon \frac{g_{12} \mathbf{m}(x, t)}{4} \quad (43)$$

with:

$$\hbar \Omega(x, t) = V_2^{ext} - V_1^{ext} + \frac{1 + \epsilon}{2} \left[(g_{22} - g_{11}) \frac{n}{2} + (g_{22} + g_{11} - 2g_{12}) \frac{m_{\parallel}}{2} \right]$$

where $\mathbf{e}_{\parallel}$ is the unit vector in the longitudinal direction in spin space.

A few simplifying assumptions are appropriate for the experimental conditions of Ref. [1]. The confining energy $(V_2^{ext} + V_1^{ext})/2$ is of order $k_B T \simeq 13 \text{ kHz} \times \hbar$ which is much larger than the mean field interaction energy $gn(0) \simeq 140 \text{ Hz} \times \hbar$. This allows us to keep only the confining energy of the harmonic trap in the effective trapping potential U_0 :

$$U_0(x) \simeq \frac{V_1^{ext}(x) + V_2^{ext}(x)}{2} = \frac{1}{2} m \omega_{ax}^2 x^2 \quad (44)$$

The differential trapping energy $V_2^{ext} - V_1^{ext} \sim 10 \text{ Hz} \times \hbar$ is even weaker than the mean field interaction energy. This ensures that the force terms $\partial_x \mathbf{U} \cdot \partial_p (f \text{ or } \mathbf{M})$ appearing in equations (40,41) are negligible. On the contrary, when the local effective magnetic field $\mathbf{U}$ does not appear under a spatial gradient, as in the term $2\mathbf{U} \times \mathbf{M}/\hbar$, it can not be neglected. This effective magnetic field $\mathbf{U}$ is made of two terms (see equation (43)): one is an effective *external* magnetic field $\hbar \Omega/2$; the other is an *exchange* magnetic field or spin mean field $g_{12} \mathbf{m}/4$ which results from the ISRE. The effective external magnetic field is the sum of the contributions of a differential Zeeman and of a differential mean field:

$$\hbar \Omega(x) = \hbar \Omega(x) \mathbf{e}_{\parallel} \simeq [V_2^{ext}(x) - V_1^{ext}(x) + (g_{22} - g_{11})n(x)/2] \mathbf{e}_{\parallel} \quad (45)$$

where, following ref. [1], we have assumed that $2g_{12} \simeq g_{11} + g_{22}$ for simplicity. The average value over the sample of the effective external magnetic field can be removed by going to a uniformly rotating frame (Larmor frame). For the numerical simulations, we need to know the x dependence of this effective magnetic field. As the profile $n(x)$ will be shown to be a Gaussian (as for a non-interacting non-degenerate gas) which does not vary in time, we model the experimentally measured effective external magnetic field by:

$$\Omega(x) = -\delta\Omega \exp(-m\omega_{ax}^2 x^2 / 2k_B T) \mathbf{e}_{\parallel} \quad (46)$$

where the parameter $\delta\Omega$ is the variation of $\Omega(x)$ between the center and the edge of the cloud.

Taking into account all approximations mentioned above, we finally arrive at equations:

$$\partial_t f + \frac{p}{m} \partial_x f - m\omega_{ax}^2 x \partial_p f \simeq -(f - f^{eq})/\tau \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{M} + \frac{p}{m} \partial_x \mathbf{M} - m\omega_{ax}^2 x \partial_p \mathbf{M} - \left(\boldsymbol{\Omega} + \frac{g_{12} \mathbf{m}}{2\hbar} \right) \times \mathbf{M} \\ \simeq -(\mathbf{M} - \mathbf{M}^{eq})/\tau \end{aligned} \quad (48)$$

The initial equilibrium Maxwell-Boltzmann distribution $f(x, p)$ solves the kinetic equation (47), so that the dynamics after the $\pi/2$ pulse can be expressed in terms of $\mathbf{M}$ only. In addition, the density $n(x)$ is obtained by integrating the equilibrium Maxwell-Boltzmann distribution over momentum p , which shows that it is time independent; from now on, we will only consider equation (48). The spin distribution immediately after the $\pi/2$ pulse is assumed to be:

$$\mathbf{M}(x, p, t = 0) = f(x, p) \mathbf{e}_{\perp, 1} \quad (49)$$

Equation (48) can be solved numerically with values of the parameters taken from Ref. [1]: the trap frequencies are $\omega_{ax}/2\pi = 7$ Hz and $\omega_{rad}/2\pi = 230$ Hz; the average time between collisions is $\tau \sim 10$ ms; the temperature is $T \simeq 0.6$ μ K; the density at the center of the trap is $n(0) = 1.8 \times 10^{13}$ cm⁻³; $\delta\Omega/2\pi$ is typically ~ 12 Hz, and the scattering lengths are $a_{11} = 100.9a_0$, $a_{22} = 95.6a_0$ and $a_{12} = 98.2a_0$ where a_0 is the Bohr radius. The solution at the center of trap is plotted in Figure 1; it shows very good agreement with the experimental observations, without any adjustable parameter.

3.2 Large, non-hydrodynamic, spin waves

Ordinary spin waves in non-degenerate gases usually occur either in the hydrodynamic regime or/and in a regime of small amplitudes [8, 9, 10]. One can then assume a small departure of the spin distribution (from either local or global equilibrium); this is similar to the first order Chapman-Enskog gradient expansion, which leads to the Navier-Stokes equations (see for instance [30]). The result is the well known Leggett equations [4], transposed from degenerate Fermi liquids to dilute non-degenerate gases [6]:

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{m} + \partial_x \mathbf{j} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{m} \\ \partial_t \mathbf{j} - \left(\boldsymbol{\Omega} + \frac{g_{12} \mathbf{m}}{2\hbar} \right) \times \mathbf{j} + \frac{k_B T}{m} \partial_x \mathbf{m} + \omega_{ax}^2 x \mathbf{m} \simeq -\frac{\mathbf{j}}{\tau} \end{aligned} \quad (50)$$

where the spin current along Ox is defined by:

$$\mathbf{j}(x, t) \equiv \int dp \frac{p}{m} \mathbf{M}(x, p, t) \quad (51)$$

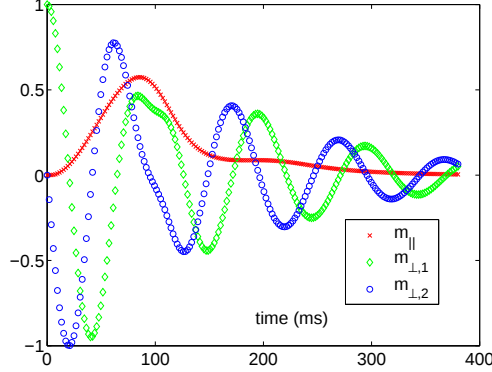


Figure 1: Time evolution of the spin polarization $\mathbf{m}$ at the center of the trap ($x = 0$) when $\delta\Omega/2\pi = 12$ Hz.

The momentum dependence has disappeared from these equations, which contain only position variables. These equations can describe spin waves, not only in the hydrodynamic regime, but also in the collisionless regime as, for example, in liquid ^3He (Silin spin waves [39]) or in $\text{H}\downarrow$ gas [40]. For a discussion of the hydrodynamic-like description of spin waves in the collisionless regime of non-degenerate dilute gases, see Refs. [16, 41].

The spin waves observed at JILA were of large amplitude and occurred in the intermediate regime between hydrodynamic and collisionless, where $\omega_{ax}\tau \sim 1$, so that there is no a priori reason to believe in the validity of the Leggett equations; we therefore need to resort to a numerical solution of the kinetic equation in terms of both position and momentum variables. Figure 2 shows the results of this calculation, and the spin density distribution (longitudinal and transverse) in p -space for different times. For comparison, the local equilibrium spin distribution is also plotted (dashed line); we see that the spin distribution in p -space can indeed get very distorted, which illustrates a strongly non-hydrodynamic situation. For very short times, $t \lesssim 40$ ms, the transverse and longitudinal spin distributions are still close to local equilibrium ($M_{\parallel}^{eq} = 0$), so that the Leggett equations are valid. For $t \gtrsim 40$ ms, this is no longer true, so that one would lose a significant part of the physics by not retaining the full momentum dependence of the distribution. In other words, studying the two first moments of the distribution ($\mathbf{m}$ and $\mathbf{j}$) is not equivalent to studying the full distribution $\mathbf{M}(p)$. What actually takes place is a phenomenon analogous to a density “shock wave” rather than a “sound wave”. Eventually, for $t \gtrsim 160$ ms (end of the “segregation”), since equilibrium is almost reached, the Leggett equations become valid again.

The initial part of the internal conversion (or state separation) can be treated analytically in several approximations, allowing for comparison between different approaches such as those of Refs. [35, 34, 36]. In Ref. [35], we solved the kinetic equation analytically, for times $t \ll \tau$, by expanding in Taylor series in time and obtained:

$$\frac{m_{\parallel}(x, t)}{n(x)} = \frac{g_{12}n(x)}{2\hbar} \left[\frac{k_B T}{m} \Omega''(x) - 2\omega_{ax}^2 x \Omega'(x) \right] \frac{t^4}{4!} \quad (52)$$

where Ω' and Ω'' are the first and second spatial derivative of $\Omega(x)$. This formula predicts an initial quartic in t behavior, which correctly reproduces the numerical results; each power of t corresponds to one of the four physical processes (i) to (iv) described in § 3.1.

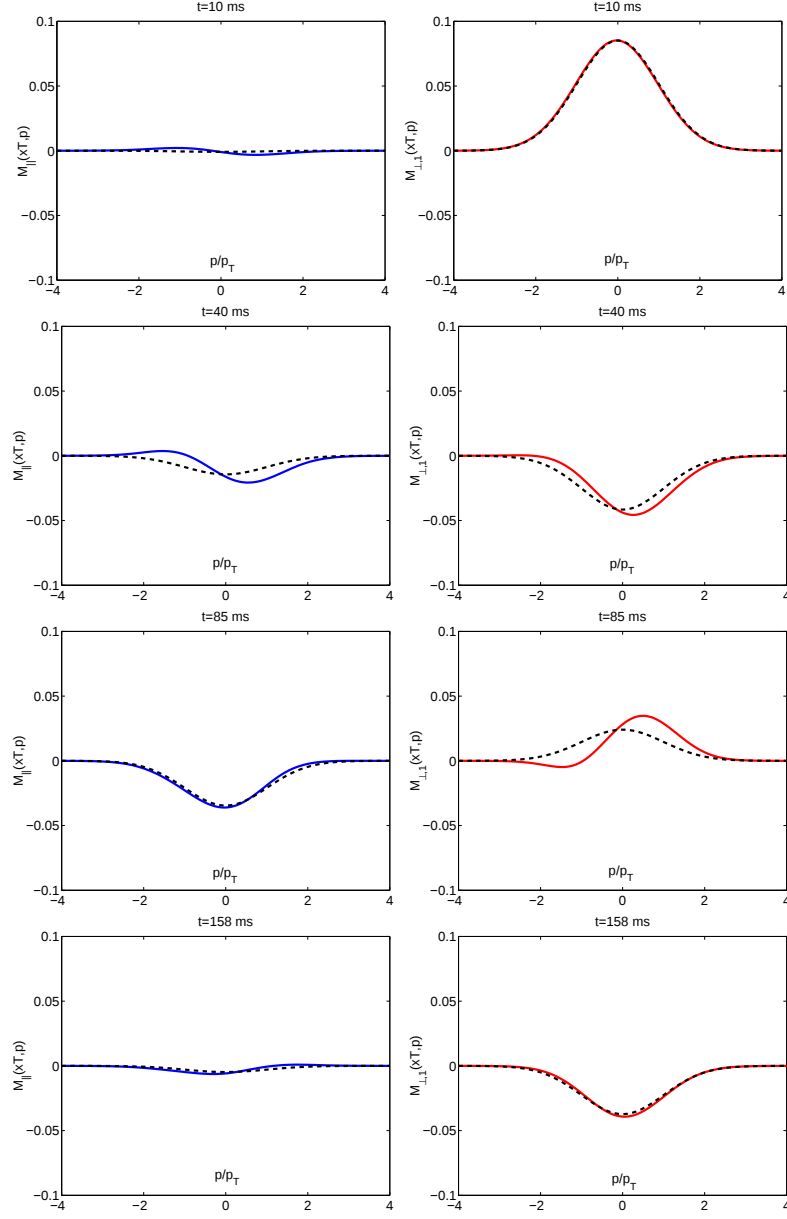


Figure 2: Longitudinal spin distribution $M_{||}(x = x_T, p, t)$ and transverse spin distribution $M_{\perp,1}(x = x_T, p, t)$ at position $x = x_T$ for $t = 10; 40; 85; 160$ ms, where $x_T = \sqrt{k_B T / m \omega_{ax}^2}$ and $p_T = \sqrt{m k_B T}$. The local equilibrium spin distribution is plotted with a dashed line.

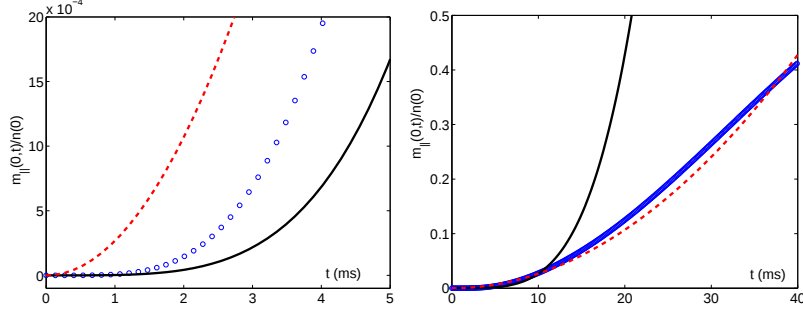


Figure 3: Beginning of the internal conversion at the center of the trap. The numerical simulation is plotted with circles, the t^4 result with a full line and the t^2 result with a dashed line.

Another approach to calculate the short time behavior is that used by Williams *et al* [36]. They use the Leggett equations which are valid for $t \ll \tau$ because the spin distribution is at equilibrium at $t = 0$. Solving the Leggett equations in the small time limit, where $-\mathbf{j}/\tau$ is negligible, they recover (52).

A third approach is to consider, following Oktel and Levitov [34]), the Leggett equations in the hydrodynamic regime. The approximation consists in assuming that the spin current remains close to its stationary value, which allows to neglect the term $\partial_t \mathbf{j}$ in equation (50). Using the resulting equations, we obtain a different behavior for small times:

$$\frac{m_{||}(x, t)}{n(x)} \sim \frac{g_{12}n(x)}{2\hbar} \left[\frac{k_B T}{m} \Omega''(x) - 2\omega_{ax}^2 x \Omega'(x) \right] \frac{(\tau t)^2}{4!} \quad (53)$$

(the effect of the hydrodynamic approximation is to replace t^2 by $t\tau$). The t^4 and t^2 results are plotted in Fig. 3; we see that times smaller than a time between collisions τ can not be dealt with in this approach. Nevertheless, after each atom has made one collision on average, the spin current is close to its stationary value and the hydrodynamic approximation is reasonably valid. Therefore, when $t > \tau \simeq 10$ ms, we get:

$$\frac{m_{||}(x, t)}{n(x)} \sim \frac{g_{12}n(x)}{2\hbar} \left[\frac{k_B T}{m} \Omega''(x) - 2\omega_{ax}^2 x \Omega'(x) \right] \frac{\tau^2 (t - t_0)^2}{4!} \quad (54)$$

(the parameter t_0 includes the accumulated effect of the retardation of the spin current $\mathbf{j}$ for small time). The $(t - t_0)^2$ behavior is plotted in Fig. 4 (the reason why, after 40 ms, the numerical solution of the kinetic equation is not well approximated by the $(t - t_0)^2$ law is that the spin distribution gets very distorted, so that the Leggett equations are no longer valid).

3.3 Decay of the phenomenon

Up to this point, we have studied mostly the initial part of the phenomenon, when the amplitude of the spin wave grows and the two species tend to separate from each other; we now discuss its final part, when the spin oscillations decay and, eventually, the system returns to equilibrium. A first remark is that it is relatively easy to obtain an order of magnitude of the time at which the transition between the two regimes occurs, i.e. the time at which the maximum of the separation takes places. For short times, we have seen that

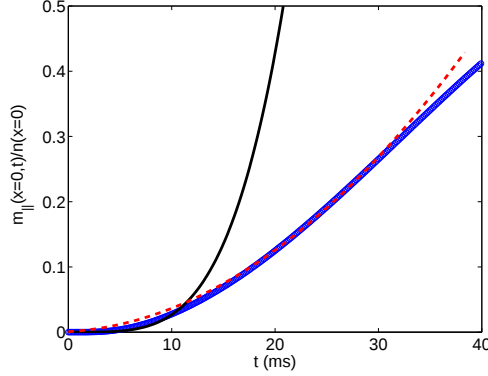


Figure 4: The numerical simulation is plotted with circles, the t^4 result with a full line and the $(t - t_0)^2$ result with a dashed line ($t_0 \sim 2$ ms here). Note the good agreement between the $(t - t_0)^2$ law and the kinetic equation in the range $\tau \simeq 10$ ms $< t \lesssim 40$ ms.

this separation is an indirect result of a differential precession of the transverse component of the spin at different points along the Ox axis; the thermal motion of the atoms then creates correlations between the transverse orientation of the spins and the sign of the x component of the velocities. But, for long times, the differential rotation of the spins will be so large that each sign of this velocity will become associated with a widely open fan of transverse orientation, with almost zero average; clearly, the selective internal conversion effect will then also average to almost zero. Let us consider the simple situation of a homogeneous gas in a box of size L with a linear gradient of external effective magnetic field Ω' . We focus, for instance, on the situation at the center of the box. At time t , atoms initially at $x = v \times t$ will cross this point with a transverse orientation rotated by an angle of the order of:

$$\Omega' \times x \times t = \Omega' v t^2 \quad (55)$$

Therefore, at times greater than:

$$t_m \sim \frac{1}{\sqrt{\Omega' v}} \quad (56)$$

the transverse directions of the spins average out so that the apparent segregation effect no longer takes place. In the case of the trapped gas, $\Omega' \sim \delta\Omega/L$ and $v \sim \omega_{ax}L$ where L is the size of the cloud, and we obtain:

$$t_m \sim \frac{2\pi}{\sqrt{\delta\Omega \omega_{ax}}} \quad (57)$$

Typical values give $t_m \sim 100$ ms in accordance with the results of the simulation. After this maximum, the system tends to return to equilibrium during a time period which we call the decay of the phenomenon.

Fig.1 shows that the decay of the longitudinal and transverse spin polarizations are significantly different. The longitudinal spin polarization $m_{\parallel}(x, t)$ returns to equilibrium in two steps: it first quickly decreases from its maximum value to almost zero in a time scale of the order of 50 ms; it then goes to zero much more slowly, on a time scale of the order of 200 ms. In order to understand this, we note in Fig.1 that, at the maximum of separation, the wave packets (or the clouds) associated with each internal state overlap only little; the

first step is then easily interpreted as the free motion of the clouds under the restoring force of the trap. It takes a quarter of a period $T_{ax}/4 = \pi/2\omega_{ax} = 36$ ms to go from the maximum of oscillation to the center of the trap. Actually, as soon as the two clouds start to overlap, they interact through a repulsive mean field ($g > 0$), so that it takes a little more time than a quarter of a period to reach the situation where the two clouds overlap significantly³. At this point, the subsequent evolution of the system can be understood as the mutual diffusion of two gases⁴; this happens ~ 150 ms after the initial pulse and can again be described by the Leggett equations (we checked on the p distribution that the system is close to local equilibrium). The relaxation time scale is then given by the spin diffusion time $t_{diff} \sim L^2/D$ (where $L \sim 2\sqrt{k_B T/m\omega_{ax}^2}$ is the size of the cloud and $D = k_B T\tau/m$ is the spin diffusion constant). Using the same parameters as in the simulation, we obtain $t_{diff} \sim 200$ ms, in good agreement with the numerical result.

We now discuss the transverse spin polarization $\mathbf{m}_\perp(x, t)$. As seen on Fig.1, it oscillates many times before going to zero. After ~ 150 ms, when the Leggett equations are valid again, we know [6] that spin waves occur in the hydrodynamic regime. The spectrum derived from these equations predicts damped transverse spin waves [6]. The damping time is of the order of the spin diffusion time $t_{diff} \sim 200$ ms, which gives an order of magnitude for the time it takes the transverse spin polarization to go from its value at the maximum of separation to zero. This is in agreement with the relaxation time obtained by numerically solving the kinetic equation (Fig.1). We finally note that the frequency of the transverse spin waves is essentially given by the external effective magnetic field precession frequency $\delta\Omega/2\pi = 12$ Hz.

3.4 “Ghost” wave packet and decoherence

We now come back to the time at which the separation is maximum. In order to simplify the discussion, we consider two clouds of atoms, one corresponding to state 1 and located around $x = d/2$, the other corresponding to state 2 located around $x = -d/2$, where d is the distance between the center of the two clouds; we note δx the width of each of these wave packets, assuming that $\delta x < d$. In this case, elementary quantum mechanics predicts that the local transverse spin polarization vanishes everywhere (this is because the local spin density corresponds to an operator which is local in ordinary space). Nevertheless, the superposition of the two wave packets remains coherent so that, rigorously speaking, the system is not equivalent to a classical mixture of two gases, in opposition to what we have assumed in the previous section.

One may wonder how this coherence translates in terms of the Wigner distribution. The answer is well known: the presence of the coherence is contained in a so-called “ghost” wave packet, which exists around the middle point between the two real wave packets (or clouds). For spinless particles, it “carries interferences with it” [44], and reconstructs them as soon as the real packets overlap again. For particles with spin, when the two separated wave packets have opposite spin orientations, the ghost wave packet centered at $x = 0$ appears only in the

³That the two clouds interact mainly through the mean field and not through (lateral) collisions is confirmed by the numerical solution of the kinetic equation. Indeed, we checked that removing the collision integral does not change the decay time scale. The role of the collision integral is merely to damp revivals of the longitudinal spin waves, which are observed when the collision integral is discarded.

⁴Actually, an instability of the transverse spin polarization is possible when there is a strong longitudinal spin polarization gradient (which is the case when the two clouds overlap again) and a spin mean field. This is known as Castaing’s instability [42]. In Ref. [43], we checked that it does not play a role in the experiment done at JILA [1].

non-diagonal spin matrix elements (transverse spin components of the Wigner distribution). In both cases, the wave packet rapidly oscillates as a function of momentum p , taking positive and negative values, with an oscillation period $2\pi\hbar/d$; the further apart the two clouds, the faster the oscillation. On the other hand, for a statistical mixture of the internal states, the ghost wave packet does not exist. Such oscillating wave packets are well-known in the context of macroscopic superpositions of states [44].

The next question is to what extent the ghost wave packet is preserved by the time evolution of the kinetic equation. Since the Wigner formalism in itself implies no approximation (it is strictly equivalent to the use of operators), the question arises only because our kinetic equation does not provide the exact quantum evolution: it was actually obtained from the operatorial (quantum) equation for the single-particle density operator by truncating the gradient expansion of the Wigner transform. In other words, we made a semi-classical approximation. But, for the ghost wave packet, the p oscillation period is $2\pi\hbar/d$ while the width of the wave packet is δx , so that the parameter of the gradient expansion is $d/\delta x$, which may be larger than 1: therefore, our kinetic equation does not necessarily remain correct for this case; the semi-classical gradient expansion may smooth the oscillations of the ghost wave packet, and artificially introduce decoherence. Another related source of artificial decoherence⁵ might come from the discretization of phase-space (necessary for the numerical solution of the kinetic equation), which may introduce a lattice spacing in momentum space larger than δp .

Up to this point, no real physical decoherence mechanism was included in our discussion: we have assumed that the system is perfectly isolated. But this is not the case in practice. In order to obtain an estimate of the physical decoherence time, we proceed by analogy with a well-understood situation in quantum optics: a macroscopic superposition of two coherent states of the electro-magnetic field in a cavity. In that case, it is known that the coherence is lost as soon as one photon on average escapes the cavity and goes in the environment [45, 46]. We therefore assume here that for our trapped gas, a source of decoherence comes from the fact that atoms can leave the trap, because of 3-body collisions for example. The time it takes one atom to leave the trap is $1/\alpha_{3b}n(0)^2N$ where $\alpha_{3b} \sim 4 \times 10^{-29} \text{ cm}^6/\text{s}$ is the 3-body recombination rate constant [47], $N \sim 10^6$ is the total number of atoms and $n(0) \simeq 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ is the density at the center of the trap. This gives $\sim 0.1 \text{ ms}$ as a rough upper bound to the physical decoherence time, which is still much shorter than the characteristic time scale of the spin state segregation. Our conclusion is therefore that, when the wave packets recombine, coherence is not likely to play a role in these experiments; this justifies our discussion in the preceding section.

4 Conclusion

We have derived a kinetic equation for a Boltzmann gas with two internal levels using different methods. A first conclusion which emerges from this work is that, for dilute gases at low temperature, several significantly different theoretical approaches lead essentially to the same result. Here we have discussed the Yvon-Snider method, with its peculiar way to close

⁵Concerning the second source of artificial decoherence, we think that it is not a problem in our simulations. We checked that, when removing the collision integral so that the kinetic equation becomes reversible, the transverse spin polarization disappears when the two wave packets do not overlap but reappears when they mix again.

the BBGKY hierarchy, the S matrix method which is very close to the spirit of the original Boltzmann equation, as well as the popular mean field method. In the latter case, the equivalence actually holds only in the low temperature limit, when forward scattering dominates over lateral scattering by a factor of the order of λ_T/a . Whether or not it is possible to find experimental situations where the results of these theories are significantly different, and can be tested experimentally, is still an open question (for instance, whether or not ISRE in lateral collisions may become dominant).

A second conclusion is that a correct treatment of the correlations between internal variables and velocities at each point of space may be important; this is illustrated by the figures contained in figure 2. In other words, hydrodynamic equations are not always appropriate. What is remarkable is that the effects of local field inhomogeneity and velocities combine non-linearly to create this almost complete separation of the two internal states; the effect is not a segregation of states but rather an internal conversion that depends on the direction of the velocity. It is probably even more remarkable that this effect was discovered experimentally, without any theoretical prediction as a guide to the appropriate experimental conditions, and appeared basically as a 100% effect from the beginning. Clearly, ISRE is not a small quantum correction to the effect of collisions, but may dominate the entire dynamics of the quantum gas!

It would be interesting to extend the present work in a few directions, for instance exploring the influence of a temperature gradient on the spin current in hydrodynamical situations, as predicted in [6]. For bosons, it would also be important to understand better how spin waves evolve progressively from the non-condensed regime, which we have studied in this article, to the condensed low temperature regime; the theory recently developed in [32] seems to provide an appropriate tool for this purpose.

Acknowledgments: Le LKB est UMR 8552 du CNRS, de l'ENS et de l'Université P. et M. Curie, Paris. Part of this work was made during a summer visit at the ECT* center of theoretical physics near Trento (Italy), to which the authors are very grateful. They also express their gratitude to J. Williams for many stimulating discussions at ECT* and, later, by e-mail.

APPENDICES: INTERACTION TERM OF THE S-MATRIX ANSATZ

Appendix I: spin-independent interactions

In this appendix, we give the detailed calculation of the Wigner transform of the collision term of the S matrix Ansatz, equation (18). We will closely follow the notations of a similar calculation done in the Appendix of Ref. [14], where the Wigner transform of the Yvon-Snyder Ansatz, equation (6) without internal levels and without exchange, is obtained to first order in the gradient expansion. We define the on-shell T matrix $\mathcal{T}$ by:

$$\hat{S} = \hat{1} - i2\pi\hat{\mathcal{T}} \quad (58)$$

and rewrite the core of the Ansatz in equation (18) as:

$$\begin{aligned} \hat{S}\hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2)\hat{S}^\dagger - \hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2) &= -i2\pi\hat{\mathcal{T}}\hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2) + \text{c.c.} \\ &+ (2\pi)^2\hat{\mathcal{T}}\hat{\rho}_1(1)\hat{\rho}_1(2)\hat{\mathcal{T}}^\dagger \end{aligned} \quad (59)$$

where c.c. is the complex conjugate of the preceding term. The first two terms of the preceding equation are linear in the T matrix, the last is quadratic. The Wigner transform $\hat{F}_T$ of the linear in T matrix operator between curly brackets in (18) is:

$$\begin{aligned} \hat{F}_T(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{P}, \mathbf{p}) &= -i(2\pi)^{-5} \hbar^{-6} \int d^3 K \int d^3 \kappa e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} \\ &\times \langle \mathbf{K}_+, \mathbf{k}_+ | \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \hat{T} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} | \mathbf{K}_-, \mathbf{k}_- \rangle + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (60)$$

where:

$$\mathbf{K}_\pm = \frac{\mathbf{P}}{\hbar} \pm \frac{\mathbf{K}}{2}; \quad \mathbf{k}_\pm = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \pm \frac{\mathbf{k}}{2} \quad (61)$$

With two closure relations for relative wavevectors $\mathbf{k}_1$ and $\mathbf{k}_2$, the r.h.s. of (60) becomes equal to:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2i(2\pi)^5 \hbar^6} \int d^3 K \int d^3 \kappa \int d^3 k_1 \int d^3 k_2 e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} \\ &\times \left(T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}_1) + \epsilon T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}_1) \hat{P}_S \right) \delta(E_{k_+} - E_{k_1}) \\ &\times \langle \mathbf{K}_+, \mathbf{k}_1 | \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) | \mathbf{K}_-, \mathbf{k}_2 \rangle \left(\delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_-) + \epsilon \delta(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_-) \hat{P}_S \right) + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (62)$$

where $\hat{P}_S$ is the exchange operator in spin space. Now using the inverse Wigner transform formula, we can introduce into (62) the Wigner transform $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ of $\hat{\rho}_1$ and replace the matrix element of the product of $\hat{\rho}$'s by:

$$\begin{aligned} &\hbar^6 \int d^3 R' \int d^3 r' e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}'} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}'} \\ &\times \hat{\rho} \left(\mathbf{R}' + \frac{\mathbf{r}'}{2}, \frac{\mathbf{P} + \hbar \mathbf{k}_1 + \hbar \mathbf{k}_2}{2} \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{R}' - \frac{\mathbf{r}'}{2}, \frac{\mathbf{P} - \hbar \mathbf{k}_1 - \hbar \mathbf{k}_2}{2} \right) \end{aligned} \quad (63)$$

When inserting the result into (62), a delta function appears:

$$\int d^3 K e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \quad (64)$$

Tracing over the orbital and the spin space of particle 2, we finally obtain the following expression for the Wigner transform $\hat{I}_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$ for the terms linear in T in the Ansatz (18):

$$\begin{aligned} \hat{I}_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \frac{1}{2i(2\pi)^2 \Delta t} \int d^3 q \int d^3 r \int d^3 \kappa \int d^3 k'_1 \int d^3 k'_2 \int d^3 r' \\ &\times e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \delta(E_{k_+} - E_{k'_1}) \\ &\times \left[\delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_-) T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) f \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \right. \\ &+ \epsilon \delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_-) T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \\ &+ \epsilon \delta(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}_-) T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \\ &\left. + \delta(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}_-) T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) f \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \right] \\ &+ \text{c.c.} \end{aligned} \quad (65)$$

with notation (11) and with:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 ; & \mathbf{k}_\pm &= \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \pm \frac{\boldsymbol{\kappa}}{2} \\ \mathbf{p}_1'' &= \mathbf{p}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2} + \hbar \frac{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2}{2} ; & \mathbf{p}_2'' &= \mathbf{p}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2} - \hbar \frac{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2}{2} \end{aligned} \quad (66)$$

The distribution f is the spin trace of $\hat{\rho}$, see equation (10).

The same kind of calculation can be done for the term quadratic in the T matrix in (18). It gives the Wigner transform $\hat{I}_{T^2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$ as:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{T^2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) &= \frac{1}{4\pi\Delta t} \int d^3q \int d^3r \int d^3\kappa \int d^3k'_1 \int d^3k'_2 \int d^3r' \\ &\times e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1)\cdot\mathbf{r}'} \delta(E_{k_+} - E_{k'_1}) \delta(E_{k_-} - E_{k'_2}) \\ &\times \left[T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) T(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) f \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \right. \\ &+ \epsilon T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) T(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \\ &+ \epsilon T(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) T(-\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \\ &\left. + T(-\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_1) T(-\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_2)^* f \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_1'' \right) \hat{\rho} \left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \mathbf{p}_2'' \right) \right] \quad (67) \end{aligned}$$

As in Ref. [26, 14], we now assume that $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ varies slowly in space over microscopic distances and expand the product of $\hat{\rho}$ and f in (65) and (67) according to

$$\begin{aligned} &\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2'') - \frac{\mathbf{r}}{2} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2'')] \\ &+ \frac{\mathbf{r}'}{2} \cdot [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'') \nabla_{\mathbf{r}_1} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2'') - (\nabla_{\mathbf{r}_1} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'')) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2'') + \dots] \end{aligned} \quad (68)$$

The first term in (68) corresponds to the local term, the two which follow to first order in gradients non-local terms. A very similar equation exists for the product of $\hat{\rho}$'s in (65) and (67).

(1) Local term We now calculate the zeroth order in gradients. The following three integrals occur:

$$\begin{aligned} \int d^3r e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} &= (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{\kappa}); & \int d^3r' e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1)\cdot\mathbf{r}'} &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \\ \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}'_1)\cdot\mathbf{r}'} &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}'_1) \end{aligned} \quad (69)$$

The linear in T matrix terms become:

$$\begin{aligned}
\hat{I}_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = & \frac{(2\pi)^4}{2i \Delta t} \int d^3 q \int d^3 k'_1 \delta(E_k - E_{k'_1}) \\
& \times \left[\delta(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}) T(\mathbf{k}, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}'_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}'_1) \right. \\
& + \epsilon \delta(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}) T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}'_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}'_1) \\
& + \epsilon \delta(\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}) T(\mathbf{k}, \mathbf{k}'_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}'_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}'_1) \\
& \left. + \delta(\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}) T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}'_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}'_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}'_1) \right] \\
& + \text{c.c.}
\end{aligned} \tag{70}$$

In the preceding equation, we note the appearance of the square of delta functions of the energy $\delta(E_k) \delta(\mathbf{k}) \propto [\delta(E_k)]^2$. They are handled by the following well-known simplification from scattering theory:

$$[\delta(E_k)]^2 = \frac{\Delta t}{2\pi \hbar} \delta(E_k) \tag{71}$$

where Δt is a time larger than the duration of a collision (see Ref. [48], for example), which simplifies with the one introduced in the S matrix Ansatz (18). The same manipulations can be done with the quadratic in T matrix term, they lead to:

$$\begin{aligned}
\hat{I}_{T^2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = & \frac{(2\pi)^4}{2\hbar} \int d^3 q \int d^3 k' \delta(E_k - E_{k'}) \\
& \times \left[T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \right. \\
& + \epsilon T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \\
& + \epsilon T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \\
& \left. + T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}')^* f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} + \hbar \mathbf{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}') \right]
\end{aligned} \tag{72}$$

We will now use different properties of the T matrix. In addition to the differential $\sigma_k(\hat{k}, \hat{k}')$ and total $\sigma_T(k)$ cross sections defined in (12), we introduce, following Ref. [13], the following cross sections:

$$\begin{aligned}
T(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) &= \frac{\hbar^2 k}{i 8 \pi^3 m} (\sigma_{fwd.}^{ex.}(k) - i \tau_{fwd.}^{ex.}(k)) \\
T(-\mathbf{k}', \mathbf{k}) T(\mathbf{k}', \mathbf{k})^* &= \frac{\hbar^4}{4 \pi^4 m^2} \left(\sigma_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') - i \tau_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') \right)
\end{aligned} \tag{73}$$

Unitarity of the S matrix implies the optical theorem:

$$\frac{T(\mathbf{k}, \mathbf{k})}{2i} + \text{c.c.} = \text{Im } T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 k}{(2\pi)^3 m} \sigma_T(k) \tag{74}$$

and the rotational invariance of the interaction Hamiltonian can be used to show that:

$$T(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tag{75}$$

Performing the integral over the length of wavevector $\mathbf{k}'$ in (70) and (72) and using the previous properties of the T matrix, we obtain the Wigner transform to zero order of the S

matrix Ansatz $\hat{I}_W = \hat{I}_T + \hat{I}_{T^2}$:

$$\begin{aligned}
\hat{I}_W(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = & - \int d^3q \frac{q}{m} \left\{ \left[\sigma_T(k) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \right. \right. \\
& + \frac{\epsilon}{2} (\sigma_{fwd.}^{ex.}(k) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_+ + i\tau_{fwd.}^{ex.}(k) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)]_-) \left. \right] \\
& - \int d^2\hat{k}' \left[\sigma_k(\hat{k}, \hat{k}') \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1') f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2') + \frac{\epsilon}{2} (\sigma_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2')]_+ \right. \\
& \left. \left. + i\tau_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1'), \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2')]_-) \right] \right\} \quad (76)
\end{aligned}$$

with the notations (11). This local term is the LL “collision integral” [13]. It contains terms linear in T matrix, usually written on the l.h.s. of the kinetic equation, as well as terms quadratic in T matrix.

The low-energy limit of the cross sections is obtained from the low-energy expression of the T matrix (5):

$$\begin{aligned}
\sigma_T(k) & \sim 4\pi a^2 & \sigma_k(\hat{k}, \hat{k}') & \sim a^2 \\
\sigma_{fwd.}^{ex.}(k) & \sim 4\pi a^2 & \sigma_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') & \sim a^2 \\
\tau_{fwd.}^{ex.}(k) & \sim -4\pi a/k & \tau_k^{ex.}(\hat{k}, \hat{k}') & \rightarrow 0
\end{aligned}$$

when $k \rightarrow 0$, see Ref. [13]. When introduced into (76), the collision integral of equation (22) is obtained, as well as the spin mean field contained in the commutator in equation (20). Other mean field terms (contained in the anticommutator) appear to first order of the gradient expansion.

(2) First order terms We retain only first order terms that are in addition linear in T matrix.

(2-a) $\mathbf{r}$ gradients The first-order terms introduce the gradient of a delta function:

$$\int d^3r \mathbf{r} e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} = -i(2\pi)^3 \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \delta(\boldsymbol{\kappa})$$

which implies taking the derivative with respect to $\boldsymbol{\kappa}$ of the function under the integral. We obtain:

$$\begin{aligned}
\frac{(2\pi)^3}{2} \int d^3q \left\{ \text{Re } T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \right. \\
- \nabla_{\mathbf{p}} [\text{Re } T(\mathbf{k}, \mathbf{k})] \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \\
+ \frac{\epsilon}{2} T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \\
- \frac{\epsilon}{2} \nabla_{\mathbf{p}} [T(\mathbf{k}, \mathbf{k})] \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \\
+ \frac{\epsilon}{2} T(\mathbf{k}, \mathbf{k})^* \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)] \\
\left. - \frac{\epsilon}{2} \nabla_{\mathbf{p}} [T(\mathbf{k}, \mathbf{k})^*] \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)] \right\} \quad (77)
\end{aligned}$$

(2-b) $\mathbf{r}'$ gradients The following integrals occur:

$$\begin{aligned}\int d^3r' e^{i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \mathbf{r}' &= -i(2\pi)^3 \nabla_{\mathbf{k}'_1} \delta(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \\ \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}'} \mathbf{r}' &= -i(2\pi)^3 \nabla_{\mathbf{k}'_1} \delta(\mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}'_1)\end{aligned}\quad (78)$$

so that we obtain:

$$\begin{aligned}\frac{(2\pi)^3}{2} \int d^3q \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \left\{ \text{Re } T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) - f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)] \right. \\ + \frac{\epsilon}{2} T(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) - \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)] \\ \left. + \frac{\epsilon}{2} T(\mathbf{k}, -\mathbf{k})^* [\nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) - \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)] \right\}\end{aligned}\quad (79)$$

The expression of the T matrix to lowest order in the scattering length (see equation (5))

$$(2\pi)^3 T(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \simeq g$$

is independent of $\mathbf{k}$. Using the preceding expression in (77) and (79), we obtain the following first order term:

$$\frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} (g n(\mathbf{r}_1) \hat{1} + \epsilon g \hat{n}(\mathbf{r}_1))]_+$$

This is the mean field term appearing in the anticommutator in the kinetic equation (20).

Appendix II: spin-dependent interactions (forward scattering)

In this appendix, we show how to obtain the full mean field in the case of spin-dependent interactions, using the S -matrix Ansatz. We will limit ourselves to collisions at low-energy, using the T matrix only at lowest order in the scattering lengths (equation (23)):

$$\langle \alpha ; \beta | \hat{T}_k | \gamma ; \delta \rangle = \delta_{\alpha, \gamma} \delta_{\beta, \delta} \frac{g_{\alpha\beta}^{(d)}}{(2\pi)^3} + (1 - \delta_{\alpha, \beta}) \delta_{\alpha, \delta} \delta_{\beta, \gamma} \frac{g_{\alpha\beta}^{(t)}}{(2\pi)^3} \quad (80)$$

where $g_{\alpha\alpha}^{(d)} \equiv g_{\alpha\alpha}$. In this limit the T matrix elements are real.

As we are interested in mean field terms, we only keep terms linear in the T matrix in the r.h.s. of the S matrix Ansatz, equation (18):

$$\frac{2\pi}{i\Delta t} T r_2 \left\{ \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} [\hat{T} \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) - \hat{\rho}_1(1) \hat{\rho}_1(2) \hat{T}] \frac{\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}}{\sqrt{2}} \right\} \quad (81)$$

where we introduced the $\mathcal{T}$ matrix (the on-shell T matrix), whose definition is given in Appendix I, equation (58). Using the properties of the trace on particle 2 and the fact that the exchange operator commutes with the $\mathcal{T}$ matrix, we can rewrite the preceding equation in the form of a commutator:

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{2\pi\hbar}{\Delta t} T r_2 \left\{ (\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}) \hat{T} \hat{\rho}_1(2) \right\}, \hat{\rho}_1(1) \right]_- \quad (82)$$

It seems therefore natural that the first operator in the commutator should play the role of an effective single-particle Hamiltonian.

We now consider a general matrix element of the preceding commutator. To simplify the notation, we only write the first term of the commutator:

$$\langle 1 : \mathbf{p}_1, \alpha | \frac{2\pi\hbar}{\Delta t} T r_2 \left\{ (\hat{1} + \epsilon \hat{P}_{ex.}) \hat{T} \hat{\rho}_1(2) \right\} \hat{\rho}_1(1) | 1 : \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \quad (83)$$

We calculate this matrix element by introducing three closure relations of the form:

$$\hat{1} = \int d^3p \sum_{\beta} |\mathbf{p}, \beta\rangle \langle \mathbf{p}, \beta| \quad (84)$$

and by using the expression (80) of the T matrix. We obtain:

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi\hbar}{(2\pi)^3 \Delta t} \times \int d^3p_2 \int d^3p_3 \delta(E_{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2} - E_{(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)/2}) \\ & \times \sum_{\beta} \left\{ g_{\alpha\beta}^{(d)} \langle \mathbf{p}_3, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \langle \mathbf{p}_4, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \right. \\ & + (1 - \delta_{\alpha,\beta}) g_{\alpha\beta}^{(t)} \langle \mathbf{p}_3, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \langle \mathbf{p}_4, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \\ & + \epsilon g_{\alpha\beta}^{(d)} \langle \mathbf{p}_3, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \langle \mathbf{p}_4, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \\ & \left. + \epsilon (1 - \delta_{\alpha,\beta}) g_{\alpha\beta}^{(t)} \langle \mathbf{p}_3, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \langle \mathbf{p}_4, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \right\} \quad (85) \end{aligned}$$

where $\mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3$. By defining the three following coupling constants:

$$g_{\alpha\alpha} = g_{\alpha\alpha}^{(d)} \quad ; \quad g_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta}^{(d)} + \epsilon g_{\alpha,\beta}^{(t)} \quad \text{if } \alpha \neq \beta \quad (86)$$

we can rewrite equation (85) as:

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi\hbar}{\Delta t} \times \int d^3p_2 \int d^3p_3 \delta(E_{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2} - E_{(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)/2}) \\ & \times \sum_{\beta} \frac{g_{\alpha\beta}}{(2\pi)^3} \left\{ \langle \mathbf{p}_4, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \langle \mathbf{p}_3, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \right. \\ & \left. + \epsilon \langle \mathbf{p}_4, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \langle \mathbf{p}_3, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \right\} \quad (87) \end{aligned}$$

We therefore see that, for both statistics (bosonic or fermionic), only three coupling constants (g_{11} , g_{22} and g_{12}) are involved.

Now, taking the Wigner transform of the operator (82) and expanding in gradients (see Appendix I) introduces another delta function of energy conservation, which is present at each order in gradients. This allows to use the “ $\delta(E)^2$ ” simplification (equation (71) in Appendix I) to make the Δt disappear. The net result is that:

$$\frac{2\pi\hbar}{\Delta t} \delta(E_{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2} - E_{(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)/2}) \quad (88)$$

gets replaced by 1. Formally the matrix element of equation (83) becomes:

$$\int d^3 p_2 \int d^3 p_3 \sum_{\beta} \frac{g_{\alpha\beta}}{(2\pi)^3} \times \left\{ \langle \mathbf{p}_4, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \langle \mathbf{p}_3, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \right. \\ \left. + \epsilon \langle \mathbf{p}_4, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}_2, \beta \rangle \langle \mathbf{p}_3, \beta | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \right\} \quad (89)$$

This result can be rewritten:

$$\langle 1 : \mathbf{p}_1, \alpha | \hat{V}^{mf}(1) \hat{\rho}_1(1) | 1 : \mathbf{p}'_1, \alpha' \rangle \quad (90)$$

where:

$$V_{\alpha\beta}^{mf}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma=1,2} g_{\alpha\gamma} \langle \mathbf{r}, \gamma | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r}, \gamma \rangle + \epsilon g_{\alpha\beta} \langle \mathbf{r}, \alpha | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r}, \beta \rangle \quad (91)$$

is the mean field potential. Therefore, equation (82) can be written formally:

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{V}^{mf}(1), \hat{\rho}_1(1) \right]_- \quad (92)$$

This equation is valid provided it is used to compute the Wigner transform and do a subsequent gradient expansion.

In the body of the article, we define the effective single-particle Hamiltonian $\hat{U}$ which is the sum of the external potential $\hat{V}^{ext}$ and of the mean field potential $\hat{V}^{mf}$. The operatorial kinetic equation is now:

$$\frac{d\hat{\rho}_1}{dt} + (i\hbar)^{-1} \left[\hat{\rho}_1, \hat{H}_1 + \hat{V}^{mf} \right]_- = 0 \quad (93)$$

The kinetic equation is then derived following the procedure of Appendix I (Wigner transform and gradient expansion up to first order); the result is:

$$\partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \hat{U}(\mathbf{r})]_- \\ - \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{p}} \hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{U}(\mathbf{r})]_+ = 0 \quad (94)$$

which is equal to the l.h.s. of (25).

References

- [1] H.J. Lewandowski, D.M. Harber, D.L. Whitaker and E.A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **88**, 07403 (2002).
- [2] J.M. McGuirk, H.J. Lewandowski, D.M. Harber, T. Nikuni, J.E. Williams and E.A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **89**, 090402 (2002).
- [3] V.P. Silin, Soviet Phys. JETP **6**, 945 (1958).
- [4] A.J. Leggett, J. Phys. C **3**, 448 (1970).
- [5] E.P. Bashkin, JETP Lett. **33**, 8 (1981); JETP **60**, 1122 (1984) .

- [6] C. Lhuillier and F. Laloë, J. Physique **43**, 225 (1982).
- [7] K. Miyake, W.J. Mullin and P.C.E. Stamp, J. Physique **46**, 663 (1985).
- [8] B.R. Johnson, J.S. Denker, N. Bigelow, L.P. Lévy, J.H. Freed, and D.M. Lee, Phys. Rev. Lett. **52**, 1508 (1984).
- [9] P.J. Nacher, G. Tastevin, M. Leduc, S.B. Crampton and F. Laloë, J. Phys. Lett **45**, L-441 (1984). G. Tastevin, P.J. Nacher, M. Leduc, F. Laloë, J. Phys. Lett. **46**, 249 (1985).
- [10] W.J. Gully and W.J. Mullin, Phys. Rev. Lett. **52**, 1810 (1984).
- [11] E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, Landau and Lifshitz Course of Theoretical Physics volume 10, *Physical Kinetics*, Pergamon Press (1981).
- [12] T.Y. Wu and T. Ohmura, *Quantum theory of scattering*, chap. A §7, Prentice Hall (1962).
- [13] C. Lhuillier and F. Laloë, J. Physique **43**, 197 (1982).
- [14] F. Laloë and W.J. Mullin, J. Stat. Phys. **59**, 725 (1990).
- [15] A.E. Meyerovich, Phys. Rev. B **39**, 9318 (1989).
- [16] E.P. Bashkin, Sov. Phys. Usp. **29**, 238 (1986).
- [17] J.A. McLennan, *Introduction to Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, Prentice Hall (1989).
- [18] D. Zubarev, V. Morozov, G. Röpke, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes*, vol. I, Akademie Verlag (1996).
- [19] E.P. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [20] M. Hillery, R.F. O'Connell, M.O. Scully and E.P. Wigner, Phys. Rep. **106**, 121 (1984).
- [21] H. Groenewold, Physica **12**, 405 (1946).
- [22] R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, vol. I, formula (30-18), Addison-Wesley (1965).
- [23] R.G. Newton, *Scattering theory of waves and particles*, Springer Verlag (1982).
- [24] J. Yvon, C. R. Acad. Sci. **246**, 2858 (1958).
- [25] R.F. Snider, J. Chem. Phys. **32**, 1051 (1960).
- [26] M.W. Thomas and R.F. Snider, J. Stat. Phys. **2**, 61 (1970).
- [27] M. Pinard and F. Laloë, J Physique **41**, 769 (1980).
- [28] E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, Landau and Lifshitz Course of Theoretical Physics volume 9, *Statistical Physics, Part 2*, Pergamon Press (1980).
- [29] A.E. Meyerovich, K.A. Musaelian, Phys. Rev. Lett. **72**, 1710 (1994); J.W. Jeon, W.J. Mullin, J. Low Temp. Phys. **88**, 433 (1992); J.W. Jeon, H.R. Glyde, Phys. Rev. B **43**, 5338 (1991).

- [30] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley, 2nd ed. (1987).
- [31] H. Smith, H.H. Jensen, *Transport Phenomena*, chapter 1, Clarendon Press, Oxford (1989).
- [32] T. Nikuni and J. Williams, arXiv:cond-mat/0304095 (2003); submitted to J. Low Temp. Phys.
- [33] J.N. Fuchs, Ph.D. thesis, Université Paris VI (2003).
- [34] M.Ö. Oktel and L. Levitov, Phys. Rev. Lett. **88**, 230403 (2002).
- [35] J.N. Fuchs, D.M. Gangardt and F. Laloë, Phys. Rev. Lett. **88**, 230404 (2002).
- [36] J. Williams, T. Nikuni and C.W. Clark, Phys. Rev. Lett. **88**, 230405 (2002).
- [37] T. Nikuni, J. Williams and C.W. Clark, Phys. Rev. A **66**, 043411 (2002).
- [38] A.S. Bradley, C.W. Gardiner, J. Phys. B **35**, 4299 (2002).
- [39] N. Masuhara, D. Candela, D.O. Edwards, R.F. Hoyt, H.N. Scholtz, D.S. Sherrill, R. Combescot, Phys. Rev. Lett. **53**, 1168 (1984).
- [40] N.P. Bigelow, J.H. Freed, D.M. Lee, Phys. Rev. Lett. **63**, 1609 (1989).
- [41] A.E. Meyerovich in Prog. Low Temp. Phys. volume 11, ed. D.F. Brewer, pp. 1-73, North-Holland, Amsterdam (1987).
- [42] B. Castaing, Physica **126B**, 212 (1984).
- [43] J.N. Fuchs, O. Prévoté, D.M. Gangardt, arXiv:cond-mat/0209506 (2002); to be published in Eur. Phys. J. D.
- [44] D. Dragoman, Phys. Lett. **A285**, 109 (2001).
- [45] J.M. Raimond, M. Brune, S. Haroche, Phys. Rev. Lett. **79**, 1964 (1997).
- [46] S. Haroche, 5^{ème} cours du Collège de France 2002-2003, <http://www.lkb.ens.fr/recherche/qedcav/college/college.html> .
- [47] E.A. Burt, R.W. Ghrist, C.J. Myatt, M.J. Holland, E.A. Cornell, C.E. Wiemann, Phys. Rev. Lett. **79**, 337 (1997).
- [48] P. Roman, *Advanced Quantum Theory*, chapter 4-1, Addison-Wesley (1965).

Annexe E

Hydrodynamic modes of a 1D trapped Bose gas

Réf. [30]. Soumis à Phys. Rev. A (arXiv :cond-mat/0305647).

Hydrodynamic modes of a 1D trapped Bose gas

J. N. Fuchs

Laboratoire Kastler Brossel, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France*

X. Leyronas and R. Combescot

Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France*

(Received June 6, 2003)

We consider two regimes where a trapped Bose gas behaves as a one-dimensional system. In the first one the Bose gas is microscopically described by 3D mean field theory, but the trap is so elongated that it behaves as a 1D gas with respect to low frequency collective modes. In the second regime we assume that the 1D gas is truly 1D and that it is properly described by the Lieb-Liniger model. In both regimes we find the frequency of the lowest compressional mode by solving the hydrodynamic equations. This is done by making use of a method which allows to find analytical or quasi-analytical solutions of these equations for a large class of models approaching very closely the actual equation of state of the Bose gas. We find an excellent agreement with the recent results of Menotti and Stringari obtained from a sum rule approach.

PACS numbers : 03.75.Kk, 05.30.Jp , 47.35.+i, 67.40.Hf

I. INTRODUCTION

Among the many experimental tools used to study Bose condensates of trapped cold atoms [1], the study of collective modes has played a quite important role. Indeed they are of high importance both experimentally and theoretically. On the experimental side they provide direct in situ informations on the system, which are free of the quantitative interpretation of expansion experiments (this is of particular importance for dense systems where the standard mean field approximation does not work). On the theoretical side the low energy collective modes are the elementary excitations and as such they play an essential role in the physical understanding of these systems. This is clear from the fact that they reduce to phonons for homogeneous systems.

The recent developments in this field have shown, among others, a growing interest in two different directions. One of them is toward the study of systems with reduced dimensionality [2]. Indeed it is experimentally possible to produce anisotropic trapping potentials which are strong enough in some directions to freeze the corresponding degrees of freedom. In these cases the ultracold atoms are in the ground state corresponding to the motion in these directions, since they have not enough energy to reach the related excited states. This produces systems which are effectively one-dimensional (1D) or two-dimensional (2D). These systems are of high fundamental interest since their physics is expected to have quite specific properties, different from those of 3D systems, which are in particular quite relevant for condensed-matter physics. By comparison atomic gases offer particularly clean, controllable and simple situations, quite close to model systems.

Another trend is toward the study of strongly interacting systems [2]. Indeed most of the experiments have been performed with gases where the interactions are weak enough to be properly described by mean field theory. We define strongly interacting systems as those for which this description is no longer valid. In 3D this corresponds to dense gases. For Bose gases the coupling to molecular states has been observed and studied very recently in these dense systems [3], and one can hope to obtain in this way molecular condensates. Another interest is to bridge the gap between dilute Bose condensates on one hand, and liquid superfluid ^4He on the other hand where the interactions are very strong. For Fermi gases it is also quite interesting to go to dense systems because the BCS-like transition, which is presently very actively looked for, is expected to have a much higher critical temperature in this regime.

Very recently Menotti and Stringari [4] (MS) have dealt with the problem of the collective oscillations in a 1D Bose gas at zero temperature, trapped in a very elongated harmonic potential well. They considered both the case of a weakly and of a strongly interacting Bose gas. The first range covers the high to intermediate density regime, where mean field theory is always valid at a microscopic level and the system is described by the Gross-Pitaevskii equation [5]. The high density limit corresponds to the case where the Thomas-Fermi approximation of this equation is valid, and the elongated gas has physically the shape of a '3D cigar'. The intermediate density regime corresponds to the case where, for the transverse directions, all the particles are in the gaussian wavefunction describing the ground state of the transverse harmonic potential and only longitudinal degrees of freedom are left. This specific situation is called the '1D mean field' regime. For all this range the system behaves for the low frequency modes as a 1D system, since the transverse collective degrees of freedom correspond to much higher frequencies. However for this

effective 1D behaviour the system is no longer effectively mean field (except in the intermediate density regime), i.e. specifically the chemical potential is no longer linear in 1D density n_1 , although the system is still microscopically described by 3D mean field. This is because one has to average over the transverse directions, which MS did from the Gross-Pitaevskii equation to obtain the chemical potential $\mu(n_1)$ as a function of n_1 .

In the second range studied by Menotti and Stringari [4], the gas goes from intermediate density (where the interaction is still weak and the 1D mean field regime applies) to low density where the interaction is effectively strong. For all this range the gas is physically in a 1D situation, with 1D particle density n_1 . A famous example of a 1D strongly interacting system is the Lieb-Liniger [6] model of hard core bosons, of mass m , interacting via a repulsive delta potential $g_1\delta(z)$, which they solved exactly. The paradoxical situation of a gas strongly interacting in a dilute limit (the so-called Tonks-Girardeau limit [7]) is actually due to the behaviour of the kinetic energy. A characteristic kinetic energy is $\hbar^2 k^2/m$, where k is typically related to the interparticle distance d by $k \sim 1/d = n_1$. This is small in the dilute regime compared to a typical interaction energy $n_1 g_1$, the ratio between these two energies being essentially the Lieb-Liniger coupling constant $\gamma = mg_1/\hbar^2 n_1$. For a D dimensional space the ratio behaves as $n_D^{1-2/D}$, so it does not depend on density for $D = 2$ and decrease with density for $D = 3$. Specifically MS studied the Lieb-Liniger model with $\mu(n_1)$ obtained numerically from the Lieb-Liniger solution. In both ranges Menotti and Stringari used a sum rule approach to obtain the lowest frequency mode as a function of frequency. For the three limiting cases of the 3D cigar, the 1D mean field and the Tonks-Girardeau limit, they recovered the results which they obtained from the analytical solution of the hydrodynamic equations.

In the present paper we will use everywhere the hydrodynamic equations as a starting point. This is a quite natural and general approach since hydrodynamics is expected to be generically valid to describe the dynamics of the system for low frequencies and long wavelengths. In particular this approach is quite natural for dilute Bose condensates since hydrodynamics appear as a consequence of the Gross-Pitaevskii equation. Actually this is quite clear in 3D, but this link is more ambiguous in 1D. Anyway we will assume that in 1D hydrodynamics is a valid starting point to obtain the low frequency collective modes of the system.

Quite recently two of us [8] (CL) considered how the fruitful hydrodynamic approach for collective oscillations in trapped Bose condensates, developed in the mean field regime [9], could be extended for strongly interacting systems where mean field is no longer valid. It was shown that, in this general case, the linear hydrodynamics could still be written in a quite convenient way. This made possible to find a number of specific functional dependence for $\mu(n)$ for which an analytical or quasi-analytical solution could be obtained. Conversely in the general case it appears possible to approximate $\mu(n)$ closely enough by some of these specific cases, considered as models, to obtain a very good approximation for the actual result, both for the frequency and the shape of the modes. This method can be applied to any mode. The flexibility of this modeling allows even in fact to invert experimental data covering a range of density to obtain the corresponding chemical potential $\mu(n)$. Since this method is equivalent to solve in a simple and efficient way the hydrodynamic equations, it is the purpose of the present paper to apply it to the case of the 1D Bose gas, in order to obtain the mode frequency from the solution of the hydrodynamic equations, rather than from the sum rule method that MS used.

The paper is organized as follows. In the following section we will recall the CL method. Actually their original paper considered only explicitly the isotropic 3D case. So we will write the generalization to any dimension D , since we are interested in 1D, and present the models we will use. Then in the next section we will consider the first case investigated by MS where the gas is microscopically 3D mean field, but behaves as a 1D system for the low frequency modes. We will show that, even if mean field does not apply at a microscopic level, the same reduction to an effective 1D problem can be obtained, by generalizing the procedure used by Stringari [10] in the case of mean field. We will obtain explicitly the 1D effective chemical potential from the 3D $\mu(n)$. Then, before turning to the case of the 1D Bose gas, we will reinvestigate the case of the 3D mean field Fermi gas in an isotropic trap, which CL had already considered. This has been motivated by our preliminary results on the 1D Bose gas which, although already quite reasonable, were not as good as expected. This led us to improve our method, essentially by making a first order correction to the result to take into account the small difference between the model $\mu(n)$ and its actual value. In order to assess the results we have considered the 3D mean field Fermi gas, for which we had direct results from the numerical integration of the hydrodynamic equations. We have also checked the sum rule method in this case. The final result of all this is that we obtain the mode frequency with a relative precision of at least 10^{-3} and often much better. Naturally this precision, which was not looked for, is much better than necessary to compare with experiment, and it is likely that there will be some time before it proves useful to be so precise. On the other hand there is no reason to put aside this precision since we have it fairly easily. Moreover it gives us a very high confidence in our results, all the more because we can use different method which agree within this precision. Finally we will turn to the 1D Bose gas, present our results and compare them with those of MS. The excellent agreement we find is a very good check for these two quite different procedures.

II. SOLVABLE MODELS FOR HYDRODYNAMICS

The CL approach [8] can be extended quite generally to anisotropic traps. We will not dwell here on this general situation since we do not intend to make a specific use of it. We are only interested in very anisotropic traps. The intermediate situation of moderately anisotropic traps is indeed not very convenient theoretically to extract informations on the system. Experimentally it is also not so frequently used and one rather deals much more often with very elongated or very flat traps, which are quasi 1-dimensional or quasi 2-dimensional. Let us just mention that, in the $\alpha - p$ modeling (see below), we are restricted to $\alpha = 2$ in this general situation. On the other hand it is possible to extend the use of quasipolynomial models (see below) to general anisotropic traps. We will rather show explicitly how the CL procedure can be used in any dimension D , having naturally in mind the interesting cases $D=1$ and $D=2$. This will at the same time allow us to provide a short recall of this approach.

As MS and CL we restrict ourselves to the case of the reactive hydrodynamics where dissipation is negligible and thermal effects can be omitted. This is valid for example at low enough temperature. In this situation we have just to write Euler equation $m d\mathbf{v}/dt = -\nabla\tilde{\mu}(\mathbf{r}, t)$ together with particle conservation $\partial n/\partial t + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = 0$ for density $n(\mathbf{r}, t)$. The global chemical potential $\tilde{\mu}(\mathbf{r}, t) = \mu(n(\mathbf{r}, t)) + V(\mathbf{r})$ has a contribution from the trapping potential $V(\mathbf{r})$ and a contribution $\mu(n(\mathbf{r}, t))$ from the fluid itself, where $\mu(n)$ is the equilibrium dependence of the chemical potential on the density, as it results from thermodynamics. At equilibrium the particle density $n_0(\mathbf{r})$ satisfies $\mu(n_0(\mathbf{r})) + V(\mathbf{r}) = \tilde{\mu}$ where $\tilde{\mu}$ is the constant value over the system of the global chemical potential. In particular $\tilde{\mu}$ is equal to the value of the trapping potential at the surface of the cloud (we take $\mu(n=0) = 0$). For small fluctuations we introduce the departure of the chemical potential from its equilibrium value $w(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mu}(\mathbf{r}, t) - \tilde{\mu} = \mu(n(\mathbf{r}, t)) - \mu(n_0(\mathbf{r})) = (\partial\mu/\partial n_0)\delta n(\mathbf{r}, t)$ where $\delta n(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) - n_0(\mathbf{r})$ is the density fluctuation. Assuming that the small fluctuations occur at frequency ω gives $i\omega\delta n = \nabla \cdot (n_0\mathbf{v}) = n_0\nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla n_0$ which, together with Euler equation $i\omega m\mathbf{v} = \nabla w$, leads to:

$$n_0\nabla^2 w + \nabla n_0 \cdot \nabla w + m\omega^2(\partial n_0/\partial \mu) w = 0 \quad (1)$$

Let us now restrict ourselves to an isotropic trap $V(r)$ in D dimensions, where r is the distance from the origin. The equilibrium relation $\mu(n_0(r)) + V(r) = \tilde{\mu}$ gives $(\partial\mu/\partial n_0)(\partial n_0/\partial r) = -V'(r)$ where $V'(r)$ is the derivative of $V(r)$ with respect to r . Then for a mode with spherical symmetry $w(\mathbf{r}) = w(r)$ Eq.(1) becomes:

$$rw'' + [D - 1 + rL'(r)]w' - \frac{m\omega^2 r}{V'(r)}L'(r)w = 0 \quad (2)$$

where we have defined $L(r) = \ln(n_0(r))$ with $L'(r) = dL/dr$. More generally a mode with an angular dependence $w(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\theta, \varphi)w(r)$ in 3D leads to:

$$rw'' + [D - 1 + rL'(r)]w' - \left[\frac{g(l)}{r} + \frac{m\omega^2 r}{V'(r)}L'(r)\right]w = 0 \quad (3)$$

where $g(l) = l(l+1)$. Similarly in 2D an angular dependence $w(\mathbf{r}) = \exp(\pm il\varphi)w(r)$ gives the same equation with $g(l) = l^2$. Finally in 1D one gets again the same equation with $g(l) = 0$. In this last case it is better to rename the variable z since it is the abscissa and goes from $-R$ to R , where R is the cloud radius. It is then convenient to make explicit the dominant dependence at small r by setting $w(r) = r^l v(r)$ which leads to:

$$rv'' + [2l + D - 1 + rL'(r)]v' - \left[\frac{m\omega^2 r}{V'(r)} - l\right]L'(r)v = 0 \quad (4)$$

This equation is valid in 3D and in 2D. It is also true in 1D with l taking only two values : $l = 0$ corresponding to the modes $w(z)$ even with respect to z , or $l = 1$ corresponding to the modes odd with respect to z .

We focus now on the most common case of the harmonic trap $V(r) = \frac{1}{2}m\Omega^2 r^2$ where Eq.(4) reduces to:

$$rv'' + [2l + D - 1 + rL'(r)]v' - (\nu^2 - l)L'(r)v = 0 \quad (5)$$

with $\nu^2 = \omega^2/\Omega^2$. This equation has the quite convenient property to be scale invariant, if the same change of scale is naturally made for $L(r)$. In particular it is unchanged under the replacement $r \rightarrow r/R$ so we can take the cloud radius R as unity in the following. More generally the change of variable $y = r^\alpha$ leads only to a modification of the constants in Eq.(5), provided again that the same change is made for $L(r)$. One finds explicitly:

$$y\frac{d^2 v}{dy^2} + \left(\Delta + y\frac{dL}{dy}\right)\frac{dv}{dy} - \frac{\nu^2 - l}{\alpha}\frac{dL}{dy}v = 0 \quad (6)$$

where $\Delta = 1 + \frac{2l+D-2}{\alpha}$. Finally we note that L' does not change if the density $n(r)$ is multiplied by a constant. So the absolute scale in density disappears and we have to deal only with the reduced density $\bar{n}(r) \equiv n(r)/n(0)$. Similarly we introduce the normalized local chemical potential $\bar{\mu}(r) \equiv \mu(n(r))/\mu(n(0))$ where $\mu(n(0))$ is related to the gas radius R by $\mu(n(0)) = \frac{1}{2}m\Omega^2 R^2$. This leads to $\bar{\mu} = 1 - r^2$, when r is expressed in units of R .

When one takes the model $dL/dy = -p/(1-y)$, Eq.(6) reduces to the hypergeometric differential equation:

$$y(1-y)\frac{d^2v}{dy^2} + [\Delta - y(p+\Delta)]\frac{dv}{dy} + p\frac{\nu^2 - l}{\alpha}v = 0 \quad (7)$$

The general solution of this equation, regular for $y = 0$, is the hypergeometric function $F(a, b; \Delta; y)$, with a and b defined by $a + b = p + \Delta - 1$ and $ab = -p\frac{\nu^2 - l}{\alpha}$. The boundary condition [8] at the surface of the cloud $y = 1$ give the further condition $a = -n$ where n is a non negative integer. In this case the solution is just a polynomial. This leads for the normal mode frequencies to the explicit result:

$$\frac{\omega^2}{\Omega^2} = l + \frac{\alpha}{p} n (n + p + \Delta - 1) \quad (8)$$

In particular for the lowest frequency mode which we will consider below, corresponding to $l = 0$ and $n = 1$, the solution is merely $v = (p + \Delta)y - \Delta$, for frequency $\nu^2 = \alpha(1 + \Delta/p)$. The above model, which we call the $\alpha - p$ model in the following, corresponds explicitly to the equilibrium density $\bar{n}(r) = (1 - r^\alpha)^p$, which arises from the equation $\bar{\mu} = 1 - (1 - \bar{n}^{1/p})^{2/\alpha}$ linking chemical potential to density. In particular for $\alpha = 2$, this is merely the power law $\bar{\mu} = \bar{n}^{1/p}$. Actually, if we consider 1D bosons, the 3D cigar, the 1D mean field and the Tonks-Girardeau limit satisfy precisely this functional dependence [4] $\bar{\mu} = \bar{n}^{1/p}$ between chemical potential and density, with the respective values $p = 2$, $p = 1$ and $p = 1/2$. This leads to the following result for the even mode frequencies ($l = 0$):

$$\frac{\omega^2}{\Omega^2} = 2n + \frac{n}{p}(2n - 1) \quad (9)$$

and:

$$\frac{\omega^2}{\Omega^2} = (1 + \frac{n}{p})(2n + 1) \quad (10)$$

for the odd mode frequencies ($l = 1$). In this last case $n = 0$ gives the 'dipole mode' (oscillation of the gas as a whole) with frequency $\omega = \Omega$. These results are in agreement with MS (their result gives the even or odd frequency modes, depending on the parity of their integer k).

In addition to the simple $\alpha - p$ model considered above, CL found also for $v(y)$ a wide class of quasi-polynomial solutions for more complex models. These quasi-polynomials are actually very rapidly converging series, which in practice behave as polynomials (one can safely cut them off above some order) because the variable y is restricted by $0 \leq y \leq 1$. The corresponding models are $dL/dy = -\sum_{k=0}^K p_k y^k / (1-y)$ and can be considered as series expansion for $(1-y)dL/dy$ around $y = 0$ with increased accuracy. They have in general $K + 1$ parameters in addition to α . In the following we will only use the $K = 1$ model ($K = 0$ is the $\alpha - p$ model) which has three parameters α, p_0 and p_1 (we will call it the 3 parameters quasi-polynomial model). It is solution of:

$$y(1-y)\frac{d^2v}{dy^2} + (q_2 y^2 + q_1 y + q_0)\frac{dv}{dy} + (r_1 y + r_0)v = 0 \quad (11)$$

with $q_2 = -p_1, q_1 = -(\Delta + p_0), q_0 = \Delta, r_1 = p_1 \frac{\nu^2 - l}{\alpha}$ and $r_0 = p_0 \frac{\nu^2 - l}{\alpha}$. The solution $v = \sum_{n=0}^N a_n y^n$ is found by solving the recursion relation [8] between the a_n 's resulting from Eq.(11). Furthermore one requires $a_{N+1} = 0$ which provides the equation allowing to find the mode frequency ν^2 . The cut-off order N is chosen large enough to insure perfect convergence. In practice we have taken in our calculation $N = 9$ or 10 , which is large enough for excellent convergence and small enough for very easy numerical calculations.

III. REDUCTION FROM A 3D TO AN EFFECTIVE 1D PROBLEM

As we already discussed in the introduction there is one clear limit where a gas cloud can be considered as a one-dimensional system. This is the case where the transverse trapping potential is so strong, compared to temperature or interaction, that only degrees of freedom corresponding to motion along the weak longitudinal trapping direction

are left. The transverse degrees of freedom are completely frozen, the atoms being all in the ground state with respect to transverse motion. However there are weaker conditions under which, with respect to the modes, one has still an effective one-dimensional physics. Indeed if we deal with low enough frequencies, the transverse degrees of freedom will not be excited and we still have to deal only with the longitudinal degrees of freedom, which corresponds to a one-dimensional physical situation. This occurs for very elongated cigar-shaped traps where the transverse trapping is not too strong. This corresponds to the 3D cigar regime studied by Menotti and Stringari [4]. In their study MS used mean field theory to obtain the effective relation between chemical potential μ and one-dimensional density n_1 to be used in their 1D treatment. Here we want to show how this result can be extended beyond mean field, and how in the framework of our approach we can derive the one-dimensional equation for the modes in the 3D cigar regime. We basically follow the procedure of Stringari [10] which amounts to integrate Eq.(1) over the transverse variables.

We consider an harmonic cigar shaped anisotropic potential, very elongated along the z axis:

$$V(r_\perp, z) = \frac{1}{2}m(\omega_\perp^2 r_\perp^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (12)$$

with $\omega_z \ll \omega_\perp$. The gas has a transverse Thomas-Fermi radius $R(z)$ which depends on the location on the z axis. Since on the border of the cloud the local chemical potential $\mu(n_0(\mathbf{r}))$ is zero, the equilibrium relation between potential and chemical potential gives:

$$\frac{1}{2}m(\omega_\perp^2 R^2(z) + \omega_z^2 z^2) = \frac{1}{2}m\omega_z^2 Z^2 \quad (13)$$

where Z is the maximal extension of the cloud along the z axis. We integrate Eq.(1) over the transverse position $\mathbf{r}_\perp$, at fixed z , inside the disk $r_\perp \leq R(z)$. The two first terms of Eq.(1) are $\nabla(n_0 \cdot \nabla w) = \nabla_\perp(n_0 \cdot \nabla_\perp w) + \nabla_z(n_0 \cdot \nabla_z w)$. When the first term is integrated, from the divergence theorem it gives $2\pi n_0 \cdot \nabla_\perp w$ to be evaluated for $r_\perp = R(z)$. This is zero since the density n_0 is zero at the cloud surface.

Now comes the fact that the transverse degrees of freedom are not excited. In this case we have locally equilibrium in the transverse direction. This implies that the chemical potential fluctuation $w(\mathbf{r})$ does not depend on $\mathbf{r}_\perp$ and depends only on z , so we have only to deal with $w(z)$. Hence $\nabla_\perp w = 0$ (at lowest order in $(\omega_z/\omega_\perp)^2$). Then in order to integrate $\nabla_z(n_0 \cdot \nabla_z w)$ over the transverse variable, it is more convenient to use, instead of $r_\perp$, the local equilibrium chemical potential $\mu(n_0(\mathbf{r}))$ as a variable. From the equilibrium condition $\mu(n_0(\mathbf{r})) + V(\mathbf{r}) = \tilde{\mu}$ we have $d\mu = -m\omega_\perp^2 r_\perp dr_\perp$ and Eq.(1) leads us to:

$$\left[\int_0^{\mu(z)} d\mu n_0 \right] \nabla_z^2 w + \nabla_z \left[\int_0^{\mu(z)} d\mu n_0 \right] \cdot \nabla_z w + m\omega_z^2 w \int_0^{\mu(z)} d\mu \frac{\partial n_0}{\partial \mu} = 0 \quad (14)$$

Here the integration over μ goes from zero (corresponding to the cloud border) to $\mu(0, 0, z) \equiv \mu(z) \equiv \frac{1}{2}m\omega_z^2(Z^2 - z^2)$ which is the local chemical potential on the z axis. Since w depends only on z we have taken it out of the integral, together with its derivatives. We are left with $\int d\mu \partial n_0 / \partial \mu = n_0(\mu(z))$ where $n_0(\mu(z))$ is the equilibrium density on the z axis. Let us introduce:

$$L(z) = \ln \left[\int_0^{\mu(z)} d\mu n_0(\mu) \right] \quad (15)$$

The argument of the logarithm is just the transverse average $\int d\mu n_0(\mu) \sim \int d\mathbf{r}_\perp n_0(\mathbf{r})$ of the three-dimensional density. We have $\nabla_z \exp L(z) = n_0(\mu(z)) d\mu(z)/dz$ with $d\mu(z)/dz = -m\omega_z^2 z \equiv -dV(z)/dz$ where $V(z) = \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 = V(0, z)$ is just the trapping potential on the z axis. Actually for our derivation we do not need an harmonic dependence on z for the trapping potential. On the other hand it is necessary to have an harmonic dependence on $\mathbf{r}_\perp$, for our change of variables. Taking all this into account Eq.(14) becomes:

$$w'' + L'(z)w' - \frac{m\omega_z^2}{V'(z)} L'(z)w = 0 \quad (16)$$

This is exactly the equation we have already obtained for 1D situations. In these cases we would have defined $L(z) = \ln n_0(z)$. We see that we have just to replace the one-dimensional equilibrium density $n_0(z)$ by the transverse average $n_1(z) \equiv \int d\mathbf{r}_\perp n_0(\mathbf{r}) = 2\pi \int d\mu n_0(\mu)/m\omega_\perp^2$ of the three-dimensional density. This sounds a physically very reasonable result. In the mean field case we have $\mu = gn_0$ which leads to $\int d\mu n_0(\mu) = \mu^2(z)/2g$ and Eq.(16) becomes explicitly for a harmonic potential:

$$\frac{1}{4}(Z^2 - z^2)w'' - zw' + \nu^2 w = 0 \quad (17)$$

with $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$. This is as expected in agreement with Stringari [10]. The above mean field relation $n_1(z) = \pi\mu^2(z)/m\omega_\perp^2 g$ with $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ is also in agreement with MS result $\mu = 2\hbar\omega_\perp (an_1)^{1/2}$ for the 3D cigar regime. This makes clear that our above treatment works only for this 3D cigar regime, since the transition to the 1D regime requires to include quantum effects, which are beyond the Thomas-Fermi approximation we had to use, consistently with hydrodynamics. Note finally that we could obviously apply the same treatment to a 2D pancake geometry.

IV. FIRST ORDER CORRECTION

As we have already explained in the introduction, we have improved the modeling used by CL and presented above by including a first order correction to the straight model evaluation of the mode frequency. This correction will be used in the two following sections, but we present it independently in this section for clarity. So let us now consider the possibility of correcting to first order the small difference between our model evaluation of the mode frequency, obtained for the model $L_0(r)$ (this can be the α - p model or the 3 parameters quasi-polynomial model), and the actual result corresponding to the true $L(r)$. This can be done conveniently for example by converting Eq.(6) into a second order differential equation which is formally identical to a Schrödinger equation (that is without first derivative). This is obtained by the change of function $\psi(y) = v(y)(y^\Delta n_0(y))^{1/2}$ which leads to:

$$-\frac{d^2\psi}{dy^2} + V(y)\psi = 0 \quad (18)$$

with the effective potential:

$$V(y) = \frac{1}{2}L'' + \frac{1}{4}L'^2 + \left(\frac{\nu^2 - l}{\alpha} + \frac{\Delta}{2}\right)\frac{L'}{y} + \frac{\Delta(\Delta - 2)}{4y^2} \quad (19)$$

Eq.(19) is a Schrödinger equation corresponding to zero energy (and $\hbar^2/2m = 1$). If we have a change $\delta L = L - L_0$, this gives a corresponding change for $V(y)$ and a variation of the energy which can be calculated by conventional first order perturbation theory. In order to keep the energy equal to zero, we have also to give a compensating variation $\delta\nu^2$ for the frequency, which is just the correction we are looking for. Explicitly this gives:

$$\int_0^1 dy \left[\frac{1}{2}\delta L'' + \frac{1}{2}L'\delta L' + \left(\frac{\nu^2 - l}{\alpha} + \frac{\Delta}{2}\right)\frac{\delta L'}{y} + \frac{\delta\nu^2}{\alpha}\frac{L'}{y} \right] \psi^2 = 0 \quad (20)$$

The $\delta L''$ term can be integrated by parts (the integrated term is zero for the range of parameters we are interested in). When one uses $L' = n'_0/n_0$ and writes $\psi(y)$ in terms of $v(y)$, one gets finally:

$$\frac{\delta\nu^2}{\alpha} \int_0^1 dy (-n'_0) y^{\Delta-1} v^2 = \int_0^1 dy \delta L' n_0 y^{\Delta-1} v \left[\frac{\nu^2 - l}{\alpha} v - yv' \right] \quad (21)$$

V. THE 3D MEAN FIELD FERMI GAS

For the reasons presented in the introduction we study here, on the 3D mean field Fermi gas, how to improve the results obtained [8] by CL, concentrating specifically on the lowest frequency compressional mode. The first point to consider is how to best approach the actual $\bar{\mu}(\bar{n})$ by a model $\bar{\mu}_{mod}(\bar{n})$. This has to be done by minimizing some estimator I of the difference between our model and the actual physical equation. Since we have been interested in precision evaluation, the choice of the estimator I of the difference between our model and the actual physical equation of state becomes a relevant one. We have considered mainly three estimators. The two first ones are the pretty obvious:

$$I^2 = \int_0^1 d\bar{n} [\bar{\mu}(\bar{n}) - \bar{\mu}_{mod}(\bar{n})]^2 \quad \text{and} \quad I^2 = \int_0^1 d\bar{\mu} [\bar{n}(\bar{\mu}) - \bar{n}_{mod}(\bar{\mu})]^2 \quad (22)$$

and there is no reason why one of them should be systematically better than the other one. Note that one way to reconcile these two estimators would be to introduce a third one where, instead of dealing with the 'horizontal' or 'vertical' distance between the two curves, one would consider the distance between the two curves perpendicular to them. However, since this is somewhat more complicated and does not bring a decisive advantage, we have not

implemented this solution. On the other hand all these estimators do not introduce a specific weighting while one could wonder for example if the high density regions are not more important than the low density ones. One possible way to introduce such a weighting is to require that the result of the first order correction we perform is as small as possible. However this correction Eq.(21) contains the shape of the mode itself, which is naturally not known before we have calculated the estimator and found its minimum. A possible way out of this dilemma is to retain only the factor in the correction which does not contain the mode and take for example:

$$I = \int_0^1 dy y^{\Delta-1} n_0 |\delta L'| \quad (23)$$

However this estimator proved in our tests to be no better and even somewhat worse than the simpler estimators Eq.(22). In the end this question of the estimator choice turned out to be a secondary one because, once the first order correction is made, either of the estimators Eq.(22) is good enough and gives excellent precision. In the same spirit, once an estimator is chosen the minimization process may be difficult when there are different minima in competition (a well known problem in spin glasses for example). However because the corrected results are anyway very good, there is no need to go to the precise minimum, and an approximate minimization is enough.

For the 3D mean field Fermi gas, with reduced units, the chemical potential is given in terms of the density by:

$$\bar{\mu} = \frac{3\bar{n}^{2/3} - 2\lambda\bar{n}}{3 - 2\lambda} \quad (24)$$

where λ is the coupling constant which goes from $\lambda = 0$ for the free Fermi gas to $\lambda = 1$ when the attractive interaction is strong enough to produce a collapse. It is given by $\lambda = 2k_F|a|/\pi$ in terms of the negative scattering length a and the Fermi wavevector k_F . Naturally the interest of this study is that we have the results of the direct numerical integration of the hydrodynamic differential equation, which gives us a benchmark for our modeling. Even this direct integration has a limited precision, which in our case is not extremely high because there is no reason to work for very high precision. So CL used the classical Runge-Kutta routine with standard precision. The resulting numerical noise can be estimated directly from inspection of their results for ν^2 as a function of λ and its first order difference. We have an absolute precision of 10^{-3} for these results on ν^2 .

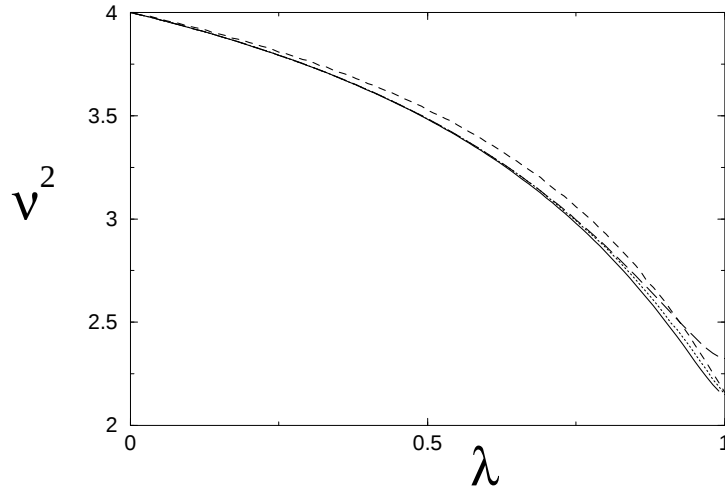


FIG. 1. Reduced lowest compressional mode frequency $\nu^2 = (\omega/\Omega)^2$ for a Fermi gas within the mean field approximation as a function of the coupling constant λ . Full line: exact result from the numerical integration of the hydrodynamic equation. Long- dashed line: sum rule result. Short-dashed line: zeroth order $\alpha - p$ model. Dotted line: zeroth order 3 parameters quasi-polynomial model.

The results of our calculations for ν^2 as a function of λ are summarized in Fig. 1. It is clear that all the approximate methods give quite reasonable agreement with direct integration. So we have plotted in Fig. 2, with a much magnified scale, the difference between our various approximate calculations and the direct integration. As found by CL the zeroth order $\alpha - p$ model gives already quite satisfactory results. Indeed the maximum deviation from the direct integration is found around $\lambda \approx 0.9$. For $\lambda = 0.9$ it gives $\nu^2 = 2.59$ compared to 2.505 from direct integration. It is easy to see why this region for λ is more difficult for $\alpha - p$ modeling. This can be understood from the behaviour of

the equilibrium density $n_0(r)$ near the origin. Since $\bar{\mu} = 1 - r^2$ we have in general $n_0(r) \approx n_0(0) + \mathcal{O}(r^2)$. On the other hand at the collapse $\lambda = 1$ we have $\partial\mu/\partial n_0 = 0$ and near the origin $n_0(r) \approx n_0(0) + \mathcal{O}(r)$. Near the collapse $n_0(r)$ is, so to speak, switching from one behaviour to another. So it is clear that its analytical behaviour will be more complex and its modeling will be accordingly more difficult.

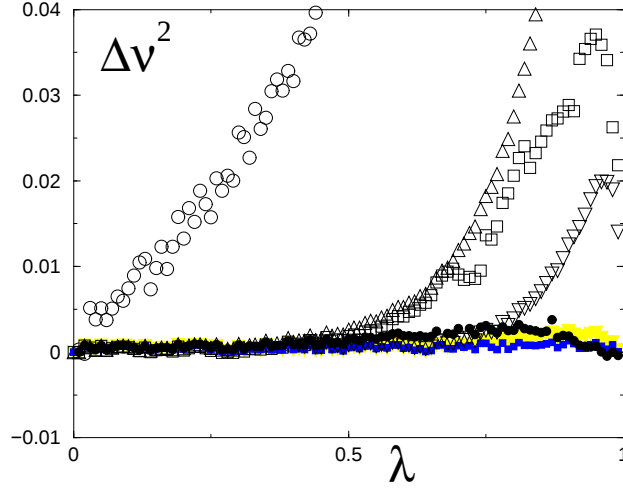


FIG. 2. Difference $\Delta\nu^2$ of the reduced mode frequency between various model results and direct integration of the hydrodynamic equation. Open circles: zeroth order $\alpha - p$ model. Open up-triangles: sum rule method. Open squares: 3 parameters quasi-polynomial model with first estimator in Eq.(22). Open down-triangles: 3 parameters quasi-polynomial model with second estimator in Eq.(22). Filled circles: corrected $\alpha - p$ model. Filled squares: corrected 3 parameters quasi-polynomial model with first estimator in Eq.(22). Filled down-triangles: corrected 3 parameters quasi-polynomial model with second estimator in Eq.(22).

Making use of the 3 parameters quasi-polynomial model makes a very important improvement as can be seen in Fig. 1 and 2. Indeed for $\lambda \lesssim 0.4$ the results are within the noise of the direct integration, that is within 10^{-3} from the exact result. Then for higher λ it starts to deviate with a maximum deviation of 0.03 for $\lambda = 0.9$, then it gets back essentially to the exact value at the collapse.

For comparison we have also plotted on Fig. 1 and 2 the result from the sum rule method [9], which is basically a variational method. We have adapted it in the following way to our present problem. We start with the expression given by MS for the monopole frequency [4] $2\omega_M^{-2} = -d \ln \langle r^2 \rangle / d\Omega^2$ (here we do not use the cloud radius as unit length). This relation is more conveniently expressed in terms of the oscillator length $l_o = \sqrt{\hbar/m\Omega}$ as:

$$\nu_M^2 = 8 \left(\frac{d \ln \langle r^2 \rangle}{d l_o / l_o} \right)^{-1} \quad (25)$$

where, as above, $\nu_M^2 = \omega_M^2 / \Omega^2$ and the derivative is taken at constant number of particles N . Now, we express $\langle r^2 \rangle$ as a function of l_o , a and the coupling constant λ defined above. In order to calculate $\langle r^2 \rangle = \int d^3\mathbf{r} r^2 n_0(r)$, we make in this integral the change of variables $t = k_F/k^*$ with $3\pi^2 n_0(r) = k_F^3$ and $k^* = \pi/2|a|$. Using the equilibrium equation (24), we get $r^2 = l_o^4 k^{*2} P(\lambda, t)$, with $P(\lambda, t) = \lambda^2 - t^2 - \frac{2}{3}(\lambda^3 - t^3)$. After a straightforward calculation, we get:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{2}{3\pi} l_o^{10} k^{*8} F_2(\lambda) \quad (26)$$

$$N = \langle 1 \rangle = \frac{2}{3\pi} l_o^6 k^{*6} F_0(\lambda) \quad (27)$$

where $F_q(\lambda) = - \int_0^\lambda dt t^3 P^{(q+1)/2} \partial P / \partial t$. From these two equations, we have:

$$d \ln \langle r^2 \rangle = (F_2'/F_2) d\lambda + 10 \frac{dl_o}{l_o} \quad (28)$$

$$d \ln N = (F_0'/F_0) d\lambda + 6 \frac{dl_o}{l_o} \quad (29)$$

where $F'_q = dF_q/d\lambda$. Since we take the derivative at constant N in Eq.(25), we can eliminate $d\lambda$ from Eq.(28,29) and using Eq.(25), this yields:

$$\nu_M^2 = \frac{4}{5 - 3 F_0 F'_2 / F'_0 F_2} \quad (30)$$

The calculation of ν_M^2 (*i.e* the monopole frequency) therefore simply amounts to calculate four integrals. As it can be seen on Fig. 1 and 2, the sum rule method does remarkably well for $\lambda \lesssim 0.4$ where it gives results within our direct integration noise. Then for larger λ it starts to deviate and gets worse and worse when one goes to the collapse, where the deviation reaches 0.18. This is clearly linked [11] to the fact that the density has a linear dependence on r at the collapse, as we have seen, while the sum rule method is best suited when there is a quadratic dependence at the center. In this respect one has to keep in mind that, even near the collapse for the trapped gas cloud as a whole, most of the gas has a density far from the one corresponding to the collapse of an homogeneous gas, because of the inhomogeneity caused by the trapping potential.

When we apply first order perturbative correction, as we have described above, we obtain a quite remarkable improvement. This is seen in Fig. 2 (the results have not been plotted in Fig. 1 since they would not be distinguishable from the direct integration). Indeed the results we get from quasipolynomial modeling agree over the whole range of values for λ with those of direct integration, within the numerical noise of 10^{-3} . This is quite gratifying, but perhaps not completely unexpected, taking into account that we have three adjustable parameters, plus a correction. More surprising is that the corrected $\alpha - p$ model gives also results which are almost within numerical noise, though the quasipolynomial results are slightly better. Since without correction the quasipolynomial model is clearly much better, as it can be seen in Fig. 1, this excellent final agreement of the $\alpha - p$ model is perhaps partially coincidental, although we find the same feature in the next section for the 1D Bose gas.

It is clear that the excellent agreement within 10^{-3} of the results from the quasipolynomial and the $\alpha - p$ model gives us very much confidence in the validity of the result itself within this precision. We could ignore the direct integration and only infer the final result from what we obtain from the various models. This is naturally the point of view that we will adopt in the next section when we will study 1D bosons.

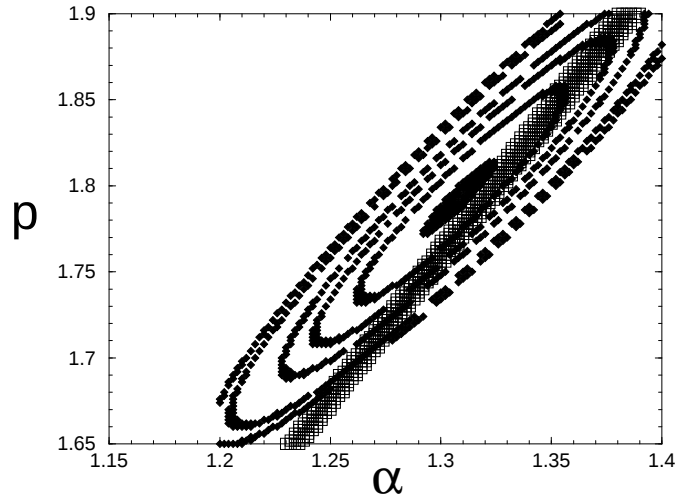


FIG. 3. Lines of equal values in the $\alpha - p$ plane for the first of the estimators Eq.(22). Starting from the minimum which is at 3.10^{-5} , the black ellipse corresponds essentially to 3.10^{-5} , the dashed lines to 4.10^{-5} , 5.10^{-5} , 6.10^{-5} , 8.10^{-5} and 9.10^{-5} respectively for I^2 . The band of open squares corresponds to the region where the reduced frequency calculated by the corrected $\alpha - p$ model is within $\pm 10^{-3}$ from the direct integration. This band is also shown in Fig. 4.

In this respect, as we mentioned already, it is interesting to note that the first order perturbative correction takes essentially care of the difference which appears when we use different modeling and/or use different estimators and/or use different minima of these estimators. In particular, as we have already mentioned, if one requires very precise results, it is not always easy to locate the absolute minimum of an estimator. The use of the first order perturbative correction solves this problem since, as we have seen, the dispersion of the corrected results is very small compared to the one of the uncorrected ones. So we are allowed a little imprecision in the choice of the parameters of our modeling, since the first order perturbative correction will compensate for the resulting error in the mode frequency. It is naturally interesting to study this point in more details. We have done it for a worst case situation $\lambda = 0.9$, a

value near a maximal dispersion of the results as we have seen. We have only considered the $\alpha - p$ model in order to have only a two-dimensional parameter space. We have covered the range $1.15 \leq \alpha \leq 1.4$, $1.65 \leq p \leq 1.9$. The lines of equal values for the first of the estimators Eq.(22) are drawn in Fig. 3. Since we are near the minimum these lines are elliptical. One sees that the minimum is quite shallow for the direction in the $\alpha - p$ plane corresponding to the large axis of these ellipses. We have also shown in this figure the region where the corrected $\alpha - p$ model gives a result within $\pm 10^{-3}$ from the direct integration. It is quite satisfactory that this region goes very near the minimum of our estimator (the difference is basically within the noise) and is essentially oriented along the large axes of the ellipses (naturally we have generically a line in the $\alpha - p$ plane corresponding to any given value of ν^2). Again for the corrected $\alpha - p$ model, we have plotted in Fig. 4 the lines of equal values for ν^2 being respectively at $\pm 10^{-3}$, $\pm 2.10^{-3}$, $\pm 5.10^{-3}$ and $\pm 7.10^{-3}$ from the direct integration result $\nu^2 = 2.505$. We see that one can take values for (α, p) which correspond to an estimator three times larger than the minimum and still obtain a result for ν^2 which is at worst only within $\pm 5.10^{-3}$ from the exact result. The corresponding value of the estimator shows that the average deviation between the model and the exact $\mu(n)$ is roughly 1%. This shows that, even with a modeling which is not very precise, we can obtain a very good result for ν^2 .

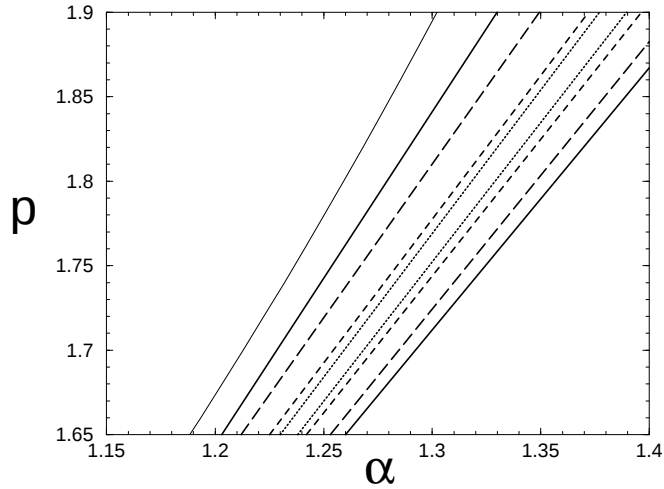


FIG. 4. Lines of equal values in the $\alpha - p$ plane for ν^2 being respectively at $\pm 10^{-3}$ (dotted line), $\pm 2.10^{-3}$ (short dashed-line), $\pm 5.10^{-3}$ (long dashed-line) and $\pm 7.10^{-3}$ (full thick line) from the direct integration result $\nu^2 = 2.505$. The full thin line corresponds to values in the $\alpha - p$ plane where the first order correction to the $\alpha - p$ model is actually zero.

When one sees the range of values for the parameters giving essentially the correct mode frequency, one may wonder if there is not another criterium than the above estimators to find a priori the best set of parameters. An interesting possibility in this direction is to say that the best parameters should not require any first order correction at all. So one should use sets of parameters giving zero correction. These sets correspond to a line in the $\alpha - p$ plane which is shown in Fig. 4. We have calculated the corresponding mode frequencies. We have found that, although the results are fairly independent of the parameter set, they fall systematically slightly above, at 2.514, compared to the correct result 2.505. Actually either of the estimators Eq.(22) turns out to be the best criterium to find the correct result (the difference between these two being within the numerical noise). This is seen in Fig. 2 where both estimators have been used.

VI. THE 1D BOSE GAS

We apply now the previously developed method to study the hydrodynamic modes of the trapped 1D Bose gas with repulsive interactions. At zero temperature, the interactions are characterized by a single parameter: the 3D s -wave scattering length a . The system we consider is the same as the one studied by Menotti and Stringari [4]. Namely, this is a Bose gas in a very anisotropic trap ($\omega_{\perp} \gg \omega_z$) for various one-dimensional configurations. The transverse oscillator length $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ is supposed to be much larger than the scattering length $a_{\perp} \gg a$. As we mentioned already in the introduction, MS identified three limiting regimes corresponding physically to decreasing 1D densities $n_1(0)$ at the center of the trap. At high density ($n_1(0)a \gg 1$), the system is in the radial Thomas-Fermi regime (3D cigar). In this case the chemical potential is related [4] to the 1D density by $\mu = 2\hbar\omega_{\perp}(an_1)^{1/2}$, as indicated already

in section III. In the second regime of intermediate densities, it is convenient to introduce the effective 1D scattering length a_1 related to the Lieb-Liniger coupling constant g_1 by $g_1 = 2\hbar^2/ma_1$. In the limit $a_\perp \gg a$, Olshanii [13] showed that $a_1 = a_\perp^2/a$ [14]. In this intermediate density regime defined by $n_1(0)a_1 \gg 1 \gg n_1(0)a$, the gas is a 1D quasi-condensate (1D mean-field regime) and the chemical potential is given by $\mu = 2\hbar\omega_\perp a n_1$ (with our conventions μ is zero for zero density). Finally at low density $1 \gg n_1(0)a_1$, the gas consists of impenetrable bosons (Tonks-Girardeau regime) where $\mu = \pi^2\hbar^2 n_1^2/2m$.

Our needed input, in order to obtain the mode frequencies, is the equation of state $\mu(n_1)$ for the homogeneous gas at zero temperature. For the transition between the 3D cigar and the 1D mean-field regimes (high density domain), it can be obtained from the numerical solution of the 3D Gross-Pitaevskii equation in a cylindrical geometry [4]. Actually, it appears that the numerical results [12] can be very well approximated analytically by:

$$\mu(n_1) = \hbar\omega_\perp(\sqrt{1 + 4n_1a} - 1) \quad (31)$$

This formula gives the exact behavior in the two limiting cases (3D cigar and 1D mean-field) defined above and interpolates very well in between (to better than 2%). In the following, we will use this approximate analytic expression which is easier to manipulate and avoids numerical problems encountered when the equation of state is only known for a fixed set of points. In the high density domain, we use the dimensionless variable $n_1(0)a$ to go from one regime to the other.

The equation of state for the transition between the 1D mean-field and Tonks-Girardeau regimes (low density domain) can be obtained from the Lieb-Liniger solution [6]. Lieb and Liniger gave a closed expression for the energy per particle as a function of the density in the form of an integral equation. It shows that the chemical potential is a universal function of n_1a_1 , which has to be evaluated numerically. Menotti and Stringari [4] calculated this equation of state and made their result available [12]. In the following, we use their data. In the low density domain, the dimensionless variable we use is $n_1(0)a_1$.

Using these equations of state, we compute the mode frequency using the following procedure: for each value of $n_1(0)a$ (or $n_1(0)a_1$) we fit the equation of state (for n_1 varying between 0 and $n_1(0)$) with an analytic model (either $\alpha - p$ or 3 parameters quasi-polynomial) using one of the estimator of equation (22); the zero order mode frequency is then obtained by inserting the value of the best set of parameters in the formula giving the mode frequency for the analytic model (Eq.(8) for the $\alpha - p$ model); we then compute the first order perturbation correction to the mode frequency.

We first discuss the different models used to compute the (squared) reduced mode frequency $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$. Fig. 5 shows ν^2 as a function of $n_1(0)a$ for a system where $a_\perp/a = 100$. Four curves are plotted. They correspond to the $\alpha - p$ model, the quasi-polynomial model, and to the same two models corrected to first order of perturbation theory. Actually, the 3 parameters quasi-polynomial model is used with only two parameters by fixing $\alpha = 2$. We checked that, in the case of the 1D Bose gas and unlike that of the 3D Fermi gas, it does not make a significant difference to let the three parameters free or to set $\alpha = 2$, whereas it is much faster and easier to work with only two parameters.

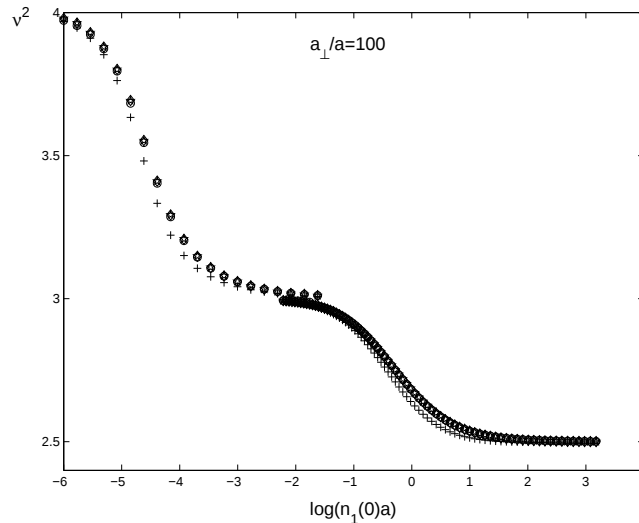


FIG. 5. Lowest compressional mode of the trapped 1D Bose gas with $a_\perp/a = 100$. The (squared) mode frequency $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ is plotted as a function of $\log(n_1(0)a)$. The crosses (+) correspond to the $\alpha - p$ model; the stars (★) to the corrected $\alpha - p$ model; the circles (○) to the quasi-polynomial model; and the diamonds (◇) to the corrected quasi-polynomial model. Actually at this scale all the symbols fall on top of each other, except for the crosses.

There are much more points plotted between the 3D cigar and the 1D mean-field regimes (high density domain) than between the 1D mean-field and the Tonks-Girardeau regime (low density domain). This is a mere consequence of the fact that we used an analytic expression for the equation of state in the first domain Eq.(31), whereas in the second one we used the numerical data of MS. Having a fixed set of points for the equation of state makes the numerical evaluation of integrals (needed to compute the correction $\delta\nu^2$, for example) more difficult because we are forced to use a primitive integration algorithm and, therefore, puts a limit on the precision and on the number of points that can be calculated safely. The fact that the junction between the two domains is not perfect (in the region of the 1D mean-field regime) is a consequence of taking a finite value for $a_\perp/a$ instead of the limit $a_\perp/a \rightarrow \infty$. As noted by MS, the 1D mean-field regime can only be identified provided $a_\perp/a \gg 1$.

In order to compare our various calculations, we look now at our results with a much larger scale, which amounts to using a magnifying glass. We take as reference the results of the corrected quasi-polynomial model. As discussed in the preceding section we expect this reference to be the best of our results and to be very precise. The difference between this reference and the three first calculations ($\alpha-p$, quasi-polynomial and corrected $\alpha-p$ models) are plotted in Fig. 6. Two points already made when discussing the 3D Fermi gas are worth stressing again in the case of the 1D Bose gas. First, once corrected, the results of the $\alpha-p$ and the quasi-polynomial models agree remarkably well. Second, their agreement is at the absolute 10^{-3} level for ν^2 .

The $\alpha-p$ model is exact in the three limiting regimes: $\alpha = 2$ and $p = 2$ in the 3D cigar regime, which gives $\nu^2 = 5/2$; $\alpha = 2$ and $p = 1$ in the 1D mean-field regime, which gives $\nu^2 = 3$; and $\alpha = 2$ and $p = 1/2$ in the Tonks-Girardeau regime, which gives $\nu^2 = 4$. In between these limits, it is apparent on Fig. 5 and 6 that the $\alpha-p$ model has some difficulties in predicting precisely the correct value of the mode frequency. This is what originally motivated the use of the 3 parameters quasi-polynomial model and the development of corrections using perturbation theory. This difficulty can actually be understood in much the same way as for the 3D Fermi gas. For example in the transition between the 3D cigar and the 1D mean field, one finds that for large $n_1(0)a$ one has essentially $\mu \sim n_1^{1/2}$ for most of the n_1 range, while for small n_1 this dependence turns into $\mu \sim n_1$. This switch of analytical behaviour is difficult to follow for the simple $\alpha-p$ model, hence the somewhat unsatisfactory result.

For the $\alpha-p$ and quasi-polynomial models, using an analytic expression for the equation of state (high density domain) gives better results than using numerical data (low density regime), as can be seen on Fig. 6. This is linked to the difficulty, mentioned above, of using purely numerical data as an entry for $\mu(n_1)$. However, the corrected models agree at the same level in both domains.

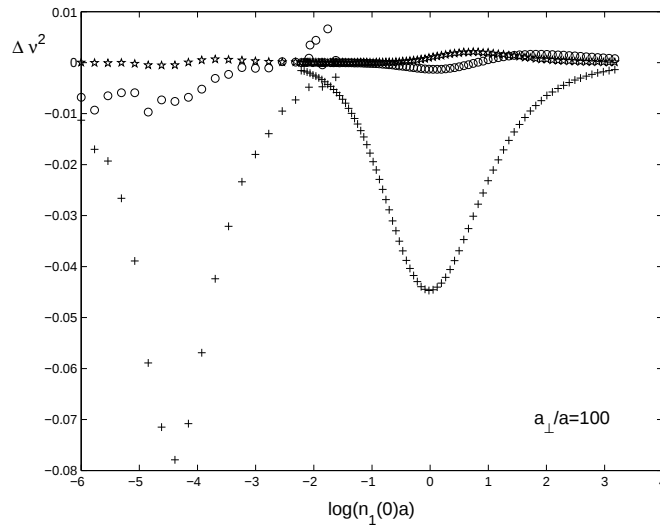


FIG. 6. Lowest compressional mode of the trapped 1D Bose gas with $a_\perp/a = 100$. The (squared) mode frequency $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ calculated using the corrected quasi-polynomial model is taken as a reference. The difference between this reference and three different calculations ($\alpha-p$, corrected $\alpha-p$ and quasi-polynomial models) are plotted as a function of $\log(n_1(0)a)$. The crosses (+) correspond to the $\alpha-p$ model; the stars (*) to the corrected $\alpha-p$ model; and the circles (o) to the quasi-polynomial model.

We will now compare our results with those of Ref. [4], first discussing the high density domain. Menotti and Stringari calculated ν^2 as a function of $Naa_\perp/a_z^2$, where $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ is the longitudinal oscillator length and N the number of particles. In this paper, we calculate the same quantity as a function of the more convenient $n_1(0)a$, which is an increasing function of $Naa_\perp/a_z^2$. Finding the relation between these two numbers amounts to obtaining the

normalized density profile. This can be done analytically in the two limiting regimes [4] and numerically in between. This allows to plot the MS result for the mode frequency and our corrected quasi-polynomial result (which we expect to be the most precise of our results) on the same graph, see Fig. 7. It shows excellent agreement, at the 10^{-2} level. Asking for agreement at a better level is not sensible here, as we used an analytic expression approximating the equation of state within a few percent and not the exact equation of state. This shows up in the fact that for high densities ($n_1(0)a > 1$), the corrected quasi-polynomial seems to predict values of the mode frequency that are higher than the result of MS. This would be in contradiction with the fact that the sum rule approach they used is known to be an exact upper bound [9].

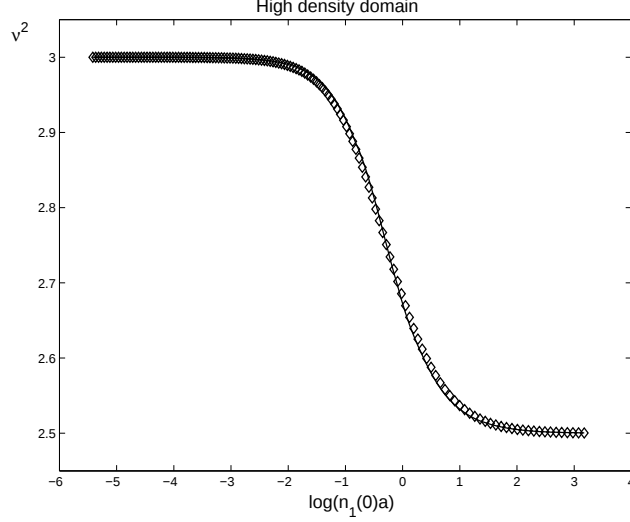


FIG. 7. Lowest compressional mode of the trapped 1D Bose gas in the high density domain. The (squared) mode frequency $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ is plotted as a function of $\log(n_1(0)a)$. The diamonds ($\diamond$) correspond to the corrected quasi-polynomial model. The full line is the result of Menotti and Stringari.

As a further check on our method, we also calculated the expected frequency for two experiments. For this purpose, the exact equation of state was used, in the form of the numerical solution of the 3D Gross-Pitaevskii equation [12]. For the experiment of Ref. [15], where $n_1(0)a = 0.22$, we find $\nu^2 = 2.845 \pm 0.003$ and $\nu^2 = 2.911 \pm 0.002$ for the experiment of Ref. [16], where $n_1(0)a = 0.10$. This is in complete agreement with the values first obtained by MS.

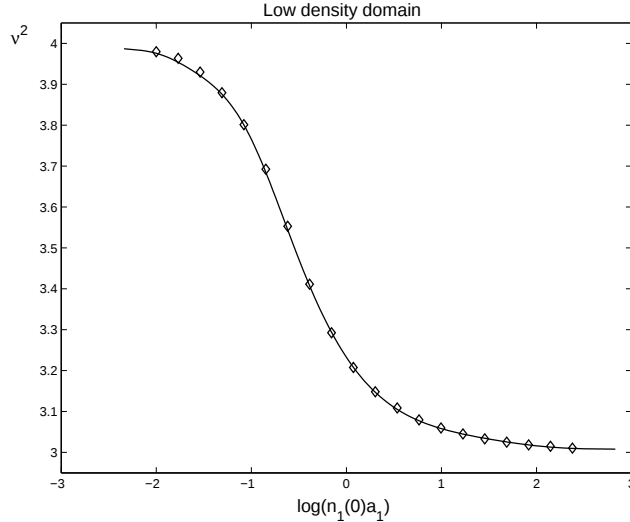


FIG. 8. Lowest compressional mode of the trapped 1D Bose gas in the low density domain. The (squared) mode frequency $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ is plotted as a function of $\log(n_1(0)a_1)$. The diamonds ($\diamond$) correspond to the corrected quasi-polynomial model. The full line is the result of Menotti and Stringari.

We consider finally the low density domain. As in the high density domain, we first have to relate the dimensionless

variable we use $n_1(0)a_1$ to Na_1^2/a_z^2 used in Ref. [4]. This is done analytically in the 1D mean-field and in the Tonks-Girardeau regime [4] and numerically in between. The mode frequency obtained by the corrected quasi-polynomial model and that calculated by MS are plotted in Fig. 8. The agreement is again very good.

The results of MS are in very good agreement with our result over the whole range of $n_1(0)a$. In the case of the 1D Bose gas, the sum rule approach [9] seems to give not only an upper bound but to be quite near the exact result. As already discussed in the case of 3D Fermi gas, this is related to the fact that the density has a quadratic dependence on r near the center of the trap. In other words, the parameter α is always very close to 2.

VII. CONCLUSION

In this paper we have calculated, as a function of density at the center of the trap, the frequency of the lowest compressional mode of a 1D trapped Bose gas, taking the reactive hydrodynamic equations as a starting point. We have considered two density regimes. In the first one the density decreases from high to intermediate, but the Bose gas is always described microscopically by 3D mean field theory. In the high density region the Bose gas has the shape of a 3D cigar, while in the intermediate density region the atoms are in the one-particle ground state with respect to the transverse motion and the gas behaves as a 1D system. Nevertheless for all this regime the low frequency modes are described by 1D hydrodynamic equations, but the effective equation of state Eq.(31) is no longer given by mean field. The second regime that we have considered goes from intermediate to low density and we have taken the Lieb-Liniger model to describe it, which corresponds to a 1D Bose gas going from a weakly to a strongly interacting situation.

In order to solve the hydrodynamic equations we have made use of a very recent approach which allows to find analytical or quasi-analytical solutions of these equations for a large class of models. These model solutions allow to approximate very nearly the exact equation of state which is the only input of the hydrodynamic equations coming from the physical properties of the system. When in addition a first order correction has been made, we have been able to check that this method gives the correct mode frequency with at least a relative precision of 10^{-3} which is more than necessary for any practical purpose. On the other hand the simplest of this model gives a very easy and convenient analytical solution. Taken together the ensemble of these models allow to cover all the range from simple analytical solutions to very precise numerical solutions. We have compared our results to those obtained by Menotti and Stringari from a sum rule approach, and we have found an excellent agreement.

The method used in this paper is quite powerful. It is not restricted to the lowest frequency mode and it can be used as well for any higher frequency mode. We have not presented the corresponding results in the present paper only to avoid to make it oversized, but this would have been quite easy. Another interest of our method is that it is not restricted to mean field and can be applied to any equation of state corresponding possibly to a very dense Bose gas. For example we could very well consider the situation where the gas is dense enough so that the 1D intermediate density situation can no longer be described by mean field [17,18]. Moreover the convenience of analytical solutions makes it possible to invert the method [8] and to extract the effective equation of state of the gas from experimental data on the variation of the modes frequencies as a function of the density.

We acknowledge numerous conversations with Y. Castin, C. Cohen-Tannoudji, J. Dalibard, D. Gangardt and C. Salomon. We are extremely grateful to Sandro Stringari and Chiara Menotti for many stimulating discussions and for providing us with their data.

* Laboratoire associé au Centre National de la Recherche Scientifique et aux Universités Paris 6 et Paris 7.

-
- [1] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999) and references therein; C. Cohen-Tannoudji, cours du collège de France, <http://www.ens.fr/cct>
 - [2] J.R. Anglin and W. Ketterle, Nature **416**, 211 (2002).
 - [3] E. A. Donley, N. R. Claussen, S. T. Thompson and C. E. Wieman, Nature **417** 529 (2002).
 - [4] C. Menotti and S. Stringari, Phys. Rev. A **66**, 043610 (2002)
 - [5] E.P. Gross, Nuovo Cimento **20**, 454 (1961); L.P. Pitaevskii, J. Exp. Theor. Phys. **40**, 646 (1961).
 - [6] E.H. Lieb, W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).
 - [7] L. Tonks, Phys. Rev. **50**, 955 (1936); M. Girardeau, J. Math. Phys. **1**, 516 (1960).
 - [8] R. Combescot and X. Leyronas, Phys.Rev.Lett.**89**, 190405 (2002).
 - [9] S. Stringari, Phys.Rev.Lett.**77** 2360 (1996).
 - [10] S. Stringari, Phys.Rev. A **58**, 2385 (1998).

- [11] We are very grateful to Sandro Stringari for this point.
- [12] We thank Chiara Menotti for providing us with her data.
- [13] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).
- [14] We follow Menotti and Stringari [4] in the definition of the effective 1D scattering length. There is a difference in sign with the definition of Olshanii [13].
- [15] A. Görlitz et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
- [16] F. Schreck et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 080403 (2001).
- [17] G.E. Astrakharchik and S. Giorgini, Phys. Rev. A **66**, 053614 (2002).
- [18] D.Blume, Phys. Rev. A **66**, 053613 (2002).

Bibliographie

- [1] C.J. Pethick, H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Cambridge University Press (2002).
- [2] H.J. Lewandowski, D.M. Harber, D.L. Whitaker and E.A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **88**, 07403 (2002).
- [3] C. Lhuillier, F. Laloë, J. Physique **43**, 197 (1982).
- [4] M.Ö. Oktel, L. Levitov, Phys. Rev. Lett. **88**, 230403 (2002).
- [5] J. Williams, T. Nikuni, C.W. Clark, Phys. Rev. Lett. **88**, 230405 (2002).
- [6] E.P. Bashkin, JETP Lett. **33**, 8 (1981) ; JETP **60**, 1122 (1984).
- [7] C. Lhuillier and F. Laloë, J. Physique **43**, 225 (1982).
- [8] B.R. Johnson, J.S. Denker, N. Bigelow, L.P. Lévy, J.H. Freed, D.M. Lee, Phys. Rev. Lett. **52**, 1508 (1984).
- [9] W.J. Gully, W.J. Mullin, Phys. Rev. Lett. **52**, 1810 (1984).
- [10] P.J. Nacher, G. Tastevin, M. Leduc, S.B. Crampton, F. Laloë, J. Phys. Lett. **45**, L-441 (1984) ; G. Tastevin, P.J. Nacher, M. Leduc, F. Laloë, J. Phys. Lett. **46**, 249 (1985).
- [11] B. Castaing, Physica **126B**, 212 (1984).
- [12] A. Kuklov, A.E. Meyerovich, Phys. Rev. A **66**, (2002) 023607.
- [13] A. Görlitz, J.M. Vogels, A.E. Leanhardt, C. Raman, T.L. Gustavson, J.R. Abo-Shaeer, A.P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
- [14] F. Schreck, L. Khaykovich, K.L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, C. Salomon, Phys. Rev. Lett. **87**, 080403 (2001).
- [15] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T.W. Hänsch, T. Esslinger, Phys. Rev. Lett. **87**, 160405 (2001).
- [16] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [17] R. Combescot, X. Leyronas, Phys. Rev. Lett. **89**, 190405 (2002).
- [18] C. Menotti, S. Stringari, Phys. Rev. A **66**, 043610 (2002).

- [19] J.E. Mayer, M. Goeppert Mayer, *Statistical Mechanics*, 2^{ème} édition, Wiley (1975).
- [20] P. Grüter, *Contribution à la Théorie des Gaz Dilués-Dégénérés*, Thèse de Doctorat, Université Paris XI (1996).
- [21] M. Holzmann, *La Transition de Bose-Einstein dans un gaz dilué*, Thèse de Doctorat, Université Paris VI (2000).
- [22] E.L. Pollock, D.M. Ceperley, Phys. Rev. B **36**, 8343 (1987).
- [23] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [24] M.R. Schafroth, Phys. Rev. **96**, 1442 (1954).
- [25] J. Matricon, G. Waysand, *La Guerre du Froid : une histoire de la supraconductivité*, Seuil (1994).
- [26] J.N. Fuchs, M. Holzmann, F. Laloë, Eur. Phys. J. B **25**, 463 (2002).
- [27] J.N. Fuchs, D.M. Gangardt, F. Laloë, Phys. Rev. Lett. **88**, 230404 (2002).
- [28] J.N. Fuchs, O. Prévoté, D.M. Gangardt, arXiv :cond-mat/0209506 (2002). A paraître dans Eur. Phys. J. D.
- [29] J.N. Fuchs, D.M. Gangardt, F. Laloë, arXiv :cond-mat/0304335 (2003). A paraître dans Eur. Phys. J. D.
- [30] J.N. Fuchs, X. Leyronas, R. Combescot, arXiv :cond-mat/0305647 (2003). Soumis à Phys. Rev. A.
- [31] G.E. Uhlenbeck, G.W. Ford, *Lectures in Statistical Mechanics*, American Mathematical Society (1962).
- [32] E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, Landau and Lifshitz Course of Theoretical Physics volume 10, *Physical Kinetics*, Pergamon Press (1981).
- [33] F. Laloë, J.H. Freed, Sci. Am. **256**, 93 (1988).
- [34] E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, Landau and Lifshitz Course of Theoretical Physics volume 9, *Statistical Physics, Part 2*, Pergamon Press (1980).
- [35] A. Vlasov, J. Phys. (U.S.S.R.) **9**, 25 (1945).
- [36] J.A. McLennan, *Introduction to Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, Prentice Hall (1989).
- [37] D. Zubarev, V. Morozov, G. Röpke, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes*, vol. I, Akademie Verlag (1996).
- [38] E.P. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [39] M. Hillery, R.F. O'Connell, M.O. Scully, E.P. Wigner, Phys. Rep. **106**, 121 (1984).
- [40] H. Groenewold, Physica **12**, 405 (1946).
- [41] J. Yvon, C. R. Acad. Sci. **246**, 2858 (1958).
- [42] R.F. Snider, J. Chem. Phys. **32**, 1051 (1960).

- [43] P. Roman, *Advanced Quantum Theory*, Addison-Wesley (1965).
- [44] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley, 2^{ème} édition (1987).
- [45] M.W. Thomas, R.F. Snider, J. Stat. Phys. **2**, 61 (1970).
- [46] A.E. Meyerovich, Phys. Rev. B **39**, 9318 (1989).
- [47] F. Laloë, W.J. Mullin, J. Stat. Phys. **59**, 725 (1990).
- [48] M. Pinard, F. Laloë, J. Physique **41**, 769 (1980).
- [49] V.P. Silin, Soviet Phys. JETP **6**, 945 (1958).
- [50] A.S. Bradley, C.W. Gardiner, J. Phys. B **35**, 4299 (2002).
- [51] A.E. Meyerovich, Phys. Lett. **107A**, 177 (1985); A.E. Meyerovich, K.A. Musesian, Phys. Rev. Lett. **72**, 1710 (1994).
- [52] W.J. Mullin, communication privée (2003).
- [53] J.W. Jeon, W.J. Mullin, Phys. Rev. Lett. **62**, 2691 (1989); J.W. Jeon, W.J. Mullin, J. Low Temp. Phys. **88**, 433 (1992); J.W. Jeon, H.R. Glyde, Phys. Rev. B **43**, 5338 (1991).
- [54] J.M. McGuirk, H.J. Lewandowski, D.M. Harber, T. Nikuni, J.E. Williams, E.A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **89**, 090402 (2002).
- [55] E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, §6 et 25 in [34].
- [56] H. Smith, H.H. Jensen, *Transport Phenomena*, chapter 1, Clarendon Press, Oxford (1989).
- [57] J. Williams, *The Preparation of Topological Modes in a Strongly Coupled Two-Component Bose-Einstein Condensate*, Thèse de Ph.D, JILA-Boulder (1999), chapitre 2 (<http://jilawww.colorado.edu/www/sro/thesis/williams/>); et Réf. [37], chapitre 2.
- [58] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique Quantique*, volume I, Hermann (1973).
- [59] P.R. Holland, *The Quantum Theory of Motion*, chapitre 9 (Spin 1/2 : the Pauli theory), Cambridge University Press (1993).
- [60] T. Nikuni, J. Williams, arXiv :cond-mat/0304095 (2003). Soumis à J. Low Temp. Phys.
- [61] E.P. Bashkin, Sov. Phys. Usp. **29**, 238 (1986).
- [62] C. Lhuillier, F. Laloë, Phys. Rev. Lett. **54**, 1207 (1985).
- [63] E. Beth, G.E. Uhlenbeck, Physica **3**, 729 (1936); **4**, 915 (1937).
- [64] G. Tastevin, P.J. Nacher, F. Laloë, Proceedings of the SPOQS III conference at the ISI center in Torino (Italy), S. Stringari ed. (1988).
- [65] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College (1976).
- [66] E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, §5 in [34].

- [67] A.J. Leggett, J. Phys. C **3**, 448 (1970).
- [68] L.P. Lévy, A.E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **52**, 1512 (1984).
- [69] B. Schwarzschild, Physics Today **37**, 19 (1984).
- [70] T.Y. Wu, T. Ohmura, *Quantum Theory of Scattering*, chapitre A §7, Prentice Hall (1962).
- [71] L.S. Levitov, communication privée (2001).
- [72] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, *Numerical Recipes*, chapitre 17, C.U.P. (1986).
- [73] J.E. Williams, communication privée (2002).
- [74] T. Nikuni, J.E. Williams, C.W. Clark, Phys. Rev. A **66**, 043411 (2002).
- [75] N.P. Bigelow, J.H. Freed, D.M. Lee, Phys. Rev. Lett. **63**, 1609 (1989).
- [76] N. Masuhara, D. Candela, D.O. Edwards, R.F. Hoyt, H.N. Scholtz, D.S. Sherrill, R. Combescot, Phys. Rev. Lett. **53**, 1168 (1984).
- [77] D. Dragoman, Phys. Lett. **A285**, 109 (2001).
- [78] S. Haroche, 5^{ème} cours du Collège de France 2002-2003, <http://www.lkb.ens.fr/recherche/qedcav/college/college.html>
- [79] E.A. Burt, R.W. Ghrist, C.J. Myatt, M.J. Holland, E.A. Cornell, C.E. Wiemann, Phys. Rev. Lett. **79**, 337 (1997).
- [80] W. Schleich, M. Pernigo, F. Le Kien, Phys. Rev. A **44**, 2172 (1991).
- [81] M. Brune, S. Haroche, J.M. Raimond, L. Davidovich, N. Zagury, Phys. Rev. A **45**, 5193 (1992).
- [82] R.J. Ragan, D.M. Schwarz, J. Low Temp. Phys. **109**, 775 (1997) ; R.J. Ragan, R.W. Weber, J. Low Temp. Phys. **118**, 167 (2000).
- [83] H. Feshbach, Ann. Phys. **19**, 287 (1962).
- [84] T. Bourdel, J. Cubizolles, L. Khaykovich, K. M. F. Magalhaes, S. J. J. M. F. Kokkelmans, G. V. Shlyapnikov, C. Salomon, arXiv :cond-mat/0303079 (2003).
- [85] V.N. Popov, *Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics*, §20, D. Reidel Pub. Comp. (1983).
- [86] E.H. Lieb, W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).
- [87] E.H. Lieb, Phys. Rev. **130**, 1616 (1963).
- [88] L. Tonks, Phys. Rev. **50**, 955 (1936).
- [89] M. Girardeau, J. Math. Phys. **1**, 516 (1960).
- [90] N.N. Bogolubov, J. Phys. (U.S.S.R.) **11**, 23 (1947).
- [91] S. Stringari, Phys. Rev. Lett. **77**, 2360 (1996).
- [92] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).

- [93] E.P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961) ; L.P. Pitaevskii *J.E.T.P.* **40**, 646 (1961).
- [94] D.S. Petrov, G.V. Shlyapnikov, J.T.M. Walraven, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3745 (2000).
- [95] Nous remercions Chiara Menotti de nous avoir permis d'utiliser ses résultats numériques.
- [96] D. Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlations Functions*, Addison-Wesley (1975).
- [97] P. Nozières, D. Pines, *The Theory of Quantum Liquids, volume II : Superfluid Bose liquids*, §5.7, Addison-Wesley (1989).
- [98] D. Pines, P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids, volume I : Normal Fermi liquids*, §1.8 et 1.9, Addison-Wesley (1965).
- [99] F.D.M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1840 (1981).
- [100] M. Abramowitz, I.A. Stegun editeurs, *Handbook of Mathematical Functions*, U.S. Government Printing Office, Washington DC (1964).
- [101] J.F. Dobson, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2244 (1994).
- [102] S. Stringari, communication privée (2002).
- [103] H.D. Ursell, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **23**, 685 (1927).
- [104] J. Yvon, *La Théorie Statistique des Fluides et l'Equation d'Etat*, Actualités Scientifiques et Industrielles, Vol. 203, Hermann, Paris (1935). Reproduit dans *Oeuvre Scientifique*, volume I, p. 35-83, CEA Saclay (1985).
- [105] J.P. Hansen, I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, 2^{ème} édition, Academic Press (1986).
- [106] P. Grüter, F. Laloë, *J. Physique* **5**, 181 (1995).
- [107] C.N. Yang, T.D. Lee, *Phys. Rev.* **87**, 404 (1952).
- [108] W.J. Mullin, *Am. J. Physics* **40**, 1473 (1972).
- [109] B. Kahn, G.E. Uhlenbeck, *Physica* **5**, 399 (1938).
- [110] T.D. Lee, C.N. Yang, *Phys. Rev.* **113**, 1165 (1959) ; **116**, 25 (1959).
- [111] P. Grüter, F. Laloë, *J. Physique* **5**, 1255 (1995).
- [112] M. Holzmann, P. Grüter, F. Laloë, *Eur. Phys. J. B* **10**, 739 (1999).
- [113] N.G. Van Kampen, *Physica* **27**, 783 (1961).
- [114] J.E. Mayer, M. Goeppert Mayer in [19], p.257-258.
- [115] G.E. Uhlenbeck, G.W. Ford in [31], chapitre III.
- [116] J.P. Hansen, I.R. McDonald in [105], p.91.
- [117] P. Grüter, F. Laloë, A.E. Meyerovich, W.J. Mullin, *J. Physique* **7**, 485 (1997).
- [118] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, I.E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Dover (1975).

- [119] G. Baym, J.P. Blaizot, M. Holzmann, F. Laloë and D. Vautherin, Phys. Rev. Lett. **83**, 1703 (1999).
- [120] A. Païs, G.E. Uhlenbeck, Phys. Rev. **116**, 250 (1959).
- [121] F. London, Nature **141**, 643 (1938).
- [122] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin-Cummings (1972).
- [123] T. Matsubara, Prog. Theoret. Phys. Japan **6**, 714 (1951).
- [124] R.P. Feynman, Phys. Rev. **91**, 1291 (1953).
- [125] O. Penrose, L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
- [126] O. Penrose, L. Onsager in [125], §7.
- [127] D.M. Ceperley, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995).
- [128] V. Elser, *Topics in Statistical Mechanics*, Thèse de Ph.D, University of California at Berkeley (1984).
- [129] W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **77**, 3695 (1996).
- [130] W.J. Mullin, S.D. Heinrichs, J.P. Fernandez, Physica B, **284-288**, 9 (2000).
- [131] M. Holzmann, W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **83**, 2687 (1999).
- [132] X. Gourdon, *Analyse (Les maths en tête)*, page 269, Ellipses (1994).
- [133] D.M. Ceperley, communication privée (2001).
- [134] B. DeMarco, D.S. Jin, Science **285**, 1703 (1999).
- [135] A.G. Truscott, K.E. Strecker, W.I. McAlexander, G.B. Partridge, R.G. Hulet, Science **291**, 2570 (2001).
- [136] K. O'Hara, S.L. Hemmer, M.E. Gehm, S.R. Granade, J.E. Thomas, Science **298**, 2179 (2002).
- [137] R. Combescot, Phys. Rev. Lett. **83**, 3766 (1999).
- [138] M. Holland, S.J.J.M.F. Kokkelmans, M.L. Chiofalo, R. Walser, Phys. Rev. Lett. **87**, 120406 (2001).
- [139] D.J. Thouless, Ann. Physics **10**, 553 (1960).
- [140] J.P. Blaizot, G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, §15.10, MIT Press (1986).
- [141] L.P. Gorkov, T.K. Melik-Barkhudarov, JETP **13**, 1018 (1961).
- [142] C.A.R. Sà de Melo, M. Randeria, J.R. Engelbrecht, Phys. Rev. Lett. **71**, 3202 (1993).
- [143] F. Laloë, "Dilute Degenerate Gases" dans A. Griffin, D.W. Snoke, S. Stringari (editors), *Bose-Einstein Condensation*, pages 122-126, Cambridge University Press (1996).
- [144] M. Holzmann in [21], page 53, équation (2.126).
- [145] L.N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).

- [146] L. Levitov, communication privée (2002).
- [147] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L.D. Carr, Y. Castin, C. Salomon, *Science*, **296**, 1290-1293 (2002).
- [148] T.D. Lee, C.N. Yang, *Phys. Rev.* **117**, 897 (1960).
- [149] Ph.A. Martin, J. Piasecki, arXiv :cond-mat/0304392 (2003). Soumis à *Phys. Rev. E*.

Contribution à la Mécanique Statistique Quantique des Gaz Froids

Résumé : Cette thèse présente un certain nombre de résultats sur la mécanique statistique des gaz froids. La première partie concerne essentiellement les gaz peu dégénérés de fermions ou de bosons avec un spin (ou un pseudo-spin) $1/2$. Nous écrivons une équation cinétique pour un tel gaz et nous en servons pour étudier les propriétés de transport de spin, notamment les ondes de spin et l'instabilité de Castaing dans un piège. En utilisant une approche hydrodynamique, nous calculons également les modes collectifs d'oscillation d'un gaz de Bose unidimensionnel dans un piège à température nulle. Dans une deuxième partie, nous nous intéressons aux propriétés d'équilibre des gaz froids denses. En utilisant le formalisme des opérateurs d'Ursell, nous étendons la théorie quantique du développement en agrégats des systèmes dilués aux systèmes denses. Nous appliquons ensuite cette méthode à l'étude de la statistique des cycles d'un condensat de Bose-Einstein et à la transition superfluide d'un gaz de Fermi attractif.

Mots clés : gaz quantiques, atomes froids, équation cinétique, niveaux internes, gaz polarisés, ondes de spin, instabilité de Castaing, hydrodynamique, développement en agrégats, cycles d'échange, opérateurs d'Ursell

Contribution to Quantum Statistical Mechanics of Cold Gases

Abstract : This thesis presents several results in statistical mechanics of cold gases. The first part mainly concerns non degenerate gases of fermions or bosons with spin (or pseudo-spin) $1/2$. We derive a kinetic equation for such gases and use it to study spin transport properties, especially spin waves and Castaing's instability in a trap. Utilizing a hydrodynamic approach, we also calculate collective modes of oscillation of a one-dimensional trapped Bose gas at zero temperature. In a second part, we study equilibrium properties of dense cold gases. In the formalism of Ursell operators, we extend the quantum theory of cluster expansion from dilute to dense systems. This method is then used to study the statistics of exchange cycles in a Bose-Einstein condensate and the superfluid transition of an attractive Fermi gas.

Keywords : quantum gases, cold atoms, kinetic equation, internal levels, polarized gases, spin waves, Castaing's instability, hydrodynamics, cluster expansion, exchange cycles, Ursell operators