Approximation des phases aléatoires self-consistante dans l'étude de la superfluidité des systèmes fermioniques

Aziz. Rabhi

▶ **To cite this version:**

Aziz. Rabhi. Approximation des phases aléatoires self-consistante dans l'étude de la superfluidité des systèmes fermioniques. Physique mathématique [math-ph]. Université Claude Bernard - Lyon I, 2002. Français. NNT : . tel-00003303

HAL Id: tel-00003303
https://theses.hal.science/tel-00003303

Submitted on 5 Sep 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.

N° d'ordre : 224-2002
N° attribué par la bibliothèque : LYCEN T 2002-85

Université Claude Bernard
Institut de Physique Nucléaire de Lyon

Mémoire de thèse
pour l'obtention du grade de
Docteur de l'Université Claude Bernard de Lyon-I
en co-tutelle avec l'Université de Tunis El-Manar
Spécialité : Physique théorique
au titre de l'École Doctorale de Physique et d'Astrophysique Fondamentale de Lyon

présenté et soutenu publiquement le *13* décembre *2002*
par M. Aziz RABHI

Approximation des Phases Aléatoires Self-Consistante dans l'étude de la superfluidité des systèmes fermioniques.

Devant la commission d'examen formée de :
M. Raouf Bennaceur (directeur de thèse)
M. Habib Bouchriha
M. Guy Chanfray (directeur de thèse)
M. Jorge Dukelsky (rapporteur)
M. Noureddine Meskini (rapporteur)
M. Jacques Meyer (président)
M. Peter Schuck

Ce travail est dédié à :

mon père, ma mère,
mes frères, mes soeurs,
toute ma grande famille,
et à tous les miens.

Remerciements

Ce travail a été réalisé à l'Institut de Physique Nucléaire de Lyon (IPNL), dans le cadre d'une thèse en co-tutelle entre l'Université de Tunis El-Manar et l'Université Claude Bernard Lyon-I. Je voudrais, tout d'abord, remercier Yves Declais, directeur de l'IPNL, de m'avoir accueilli dans son laboratoire. Cette thèse a été dirigée par les professeurs Raouf Bennaceur et Guy Chanfray, auxquels j'adresse mes remerciements les plus vifs, ma profonde gratitude et l'expression de ma grande reconnaissance. De la même façon, je tiens à exprimer mes remerciements les plus chaleureux, ma profonde gratitude et ma reconnaissance infinie à Peter Schuck (directeur de recherche CNRS à Orsay) avec qui j'ai collaboré, étroitement, au cours de ce travail. C'est grâce à leurs conseils judicieux, à leurs encouragements constants et leur soutien que j'ai pu mener à bien ce travail.

Je tiens à remercier le professeur Jacques Meyer de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Je suis très reconnaissant aux professeurs Jorge Dukelsky et Noureddine Meskini, d'avoir bien voulu être rapporteur de ce travail, de faire partie du jury et pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail.

Je souhaite également exprimer ma reconnaissance à Monsieur Habib Bouchriha pour ses encouragements et ses conseils et d'avoir participé au jury.

Je voudrais aussi remercier tous les enseignants qui ont contribué à ma formation.

Je ne saurais passer sous silence l'ambiance fraternelle dont j'ai toujours bénéficié de la part de mes amis français, celle qui vient directement dans mon esprit est Céline Pujol qui m'a beaucoup soutenu et beaucoup aidé lors des moments difficiles, je n'oublierais jamais nos pauses cafés (soit café cappuccino, soit le fameux thé "oncle mouss" de Hubert ou encore les nombreux cafés d'articles qu'ils soient publiés, refusés, soumis, etc, toutes les occasions sont bonnes) dans notre petit coin au 3^{eme} étage, mon cobureau "Hub" Hubert Hansen et ses tartes aux fraises (je suis sûr qu'il ne va pas oublier les pâtes au thon), Micaela Oertel et son délicieux gâteau tiramisu, Dany Davesne qui ne va jamais oublier le workshop du couscous Tunisien, Michael Urban, Cécile Aufranc, Carole Heritier, Pierre-Antoine Delsart (qui a partagé mes pauses déjeuner en compagnie de Florent Tournus à la cantine de l'IPNL), Karim Bennaceur.... Je n'oublierais pas, bien sûr, la cordiale collaboration dont j'ai toujours bénéficié de la part de mes amis tunisiens ; qu'ils trouvent ici l'expression de ma grande reconnaissance. Merci à tous mes amis qui m'ont supporté dans les bons et mauvais moments, leur éternelle bonne humeur m'a permis d'affronter plus sereinement ces années de travail.

Enfin merci à tous les membres du groupe théorie de l'IPNL ainsi que tous les autres membres et personnels de l'Institut, croisés au hasard d'un café ou un coin de couloir, en particulier, madame Lucile Chosson, et notre bibliothécaire, Sylvie Flores, toujours souriantes et disponibles.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à tout le personnel du service informatique de l'IPNL, du centre de calcul de l'IN2P3 et du centre de calcul El-Khawarizmi.

Mes parents, mes frères et soeurs sont toujours dans mon coeur, c'est grâce à leur soutien, leur patience, leur sacrifice que j'ai pu réaliser mon travail.

Table des matières

1 Introduction **1**

I Les approximations du champ moyen et au-delà **5**

1 Approximation du champ moyen **9**
1.1 Méthode variationnelle 9
1.2 L'approximation de Hartree-Fock 10
1.2.1 Fonctions d'onde d'essai et énergie de Hartree-Fock 10
1.2.2 Les équations de Hartree-Fock 12
1.3 Conclusion 13

2 Corrélations d'appariement dans les noyaux **15**
2.1 L'état fondamental BCS 15
2.2 Les équations BCS 17
2.3 Considérations dynamiques 19
2.4 Conclusion 20

3 Approximation des phases aléatoires **21**
3.1 Position du problème 21
3.2 Equations RPA dans le cas des corrélations *ph* 22
3.2.1 Energie du fondamental dans la méthode RPA 24
3.2.2 Construction de l'état fondamental RPA 26
3.2.3 Relations d'orthonormalisation et de fermeture 26
3.3 Cas des corrélations *pp* et *hh* 28
3.4 Conclusion 29

4 RPA Self-Consistante **31**
4.1 Introduction 31
4.2 La RPA Self-Consistante 31
4.2.1 Choix de l'opérateur d'excitation RPA 31
4.2.2 Les équations RPA 33
4.3 Conclusion 35

5 Brisure et restauration de symétrie **37**
5.1 Symétries et champ moyen 37
5.2 Brisure spontanée de symétrie 37
5.3 Restauration de symétrie 38
5.3.1 Projection sur le nombre de particules 39
5.4 Mode spurieux 40

II Phénomène d'appariement. Modèle à deux et à un niveaux 43

1 Présentation du modèle 47

2 Phase superfluide 49
2.1 Transformation de Bogoliubov . . . 49
2.2 Opérateur nombre total de particules . . . 50
2.3 Hamiltonien . . . 51
2.4 La QRPA Self-Consistante . . . 52
2.4.1 Opérateurs d'excitation RPA et vide RPA . . . 52
2.4.2 Matrice RPA . . . 53
2.4.3 Minimisation de l'énergie . . . 55
2.4.4 Valeurs moyennes . . . 58
2.5 Nombres d'occupation . . . 59
2.5.1 Développement bosonique . . . 59
2.5.2 Méthode de l'opérateur identité . . . 61
2.6 Quasi-particule RPA . . . 64
2.6.1 Solution de champ moyen . . . 65
2.6.2 Approximation QRPA . . . 66
2.6.3 Opérateur nombre total de particules . . . 67

3 Phase du fluide normal 69
3.1 RPA Self-consistante . . . 69
3.2 Calcul des valeurs moyennes des densités . . . 70
3.2.1 Construction de l'état fondamental RPA . . . 70
3.2.2 Calcul des valeurs moyennes des densités . . . 72
3.3 RPA standard . . . 73

4 Résultats numériques 75
4.1 Méthode de résolution numérique . . . 75
4.2 Discussion des résultats . . . 75
4.3 Comparaison avec d'autres travaux . . . 93
4.4 Conclusion . . . 95

5 Modèle de la Séniorité 97
5.1 Présentation du modèle . . . 97
5.2 QRPA Self-consistente . . . 98
5.2.1 Opérateurs Quasi-particule . . . 98
5.2.2 Hamiltonien du modèle . . . 98
5.2.3 Opérateur d'excitation RPA . . . 99
5.2.4 Matrice RPA . . . 100
5.2.5 Minimisation de l'énergie . . . 101
5.2.6 Energies d'excitation RPA . . . 101
5.2.7 Nombre d'occupation . . . 102
5.3 Résultats et discussion . . . 103
5.3.1 Cas de la méthode SCQRPA avec une contrainte . . . 103
5.3.2 Cas de la méthode SCQRPA avec deux contraintes . . . 108
5.4 Conclusion . . . 110

III Modèle de Da-Providencia et Schütte 113

1 Présentation du modèle 117
1.1 Structure de la solution exacte de H . . . 118

2 RPA Self-consistante **121**
2.1 Zone déformée . . . 121
2.1.1 Fermions . . . 121
2.1.2 Bosons . . . 122
2.1.3 Opérateur de symétrie . . . 123
2.1.4 Hamiltonien . . . 123
2.1.5 Opérateur d'excitation RPA . . . 124
2.1.6 Matrice RPA . . . 125
2.1.7 Minimisation d'énergie . . . 126
2.2 Zone sphérique . . . 127
2.2.1 RPA Self-Consistante . . . 127

3 Résultats et discussion **129**
3.1 Résultats exacts . . . 129
3.2 Discussion et résultats en SCRPA . . . 130
3.3 Conclusion . . . 140

IV Conclusions générales **143**

Table des figures

2.1 Comportement qualitatif de $E'(\Delta)$ pour G au dessus et en dessous de la valeur critique G_c. 20
2.2 Surface bidimensionnelle pour un système avec symétrie continuement brisée. . . . 20

3.1 Excitation $p-h$ dans la méthode HF. 22

4.1 Energie fondamentale E_{gs} et énergie du premier état excité 0^+ E_{exc} en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 12$ (les énergies sont divisées par 2ϵ). Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$. On note que les solutions ppSCRPA et SCQRPA coexistent dans une large gamme des valeurs de V. 78
4.2 Agrandissement de la courbe de l'énergie fondamentale E_{gs} (voir bas de la figure (4.1)). 79
4.3 Même quantités que la figure (4.1), pour $N = 8$. 81
4.4 Même quantités que la figure (4.1), pour $N = 4$. 82
4.5 Même quantités que la figure (4.1), pour $N = 14$. 83
4.6 Energie d'excitation du mode mou (spurieux) (les énergies sont divisées par 2ϵ) en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 10$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$. 84
4.7 Même quantités que la figure (4.6), pour $N = 4$. 84
4.8 Même quantités que la figure (4.6), pour $N = 12$. 85
4.9 Comparaison entre les résultats exacts, SCQRPA et BCS des potentiels chimiques $\mu = \frac{1}{2}(\mu^+ + \mu-)$ et $\mu^\pm = \pm\frac{1}{2}(E_0^{N\pm2} - E_0^N)$, pour un nombre de particules $N = 4$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$. 86
4.10 Même quantités que la figure (4.9), pour $N = 8$. 87
4.11 Même quantités que la figure (4.9), pour $N = 12$. 88
4.12 Energies d'excitation $2\mu^+$ et $2\mu^-$ (les énergies sont divisées par 2ϵ) en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 12$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$. Les lignes continues correspondent aux résultats exacts, les lignes interrompues aux résultats ppSCRPA ayant le nombre d'occupation calculé avec l'état fondamental exact (3.29), et les lignes pointillés aux résultats ppSCRPA ayant le nombre d'occupation calculé avec le développement (2.74). 89
4.13 Nombre de particules dans le niveau supérieur N_1 en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour $N = 12$. Le spin de chaque niveau est égal à $J = 11/2$. 90
4.14 La variance du nombre total de particules en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 10$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$. . . 91
4.15 Même quantités que la figure (4.14), pour $N = 12$. 91
4.16 Même quantités que la figure (4.14), pour $N = 14$. 92
4.17 La fonction de corrélation $\mathcal{C}$ en function de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 12$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$. 92
4.18 Même quantités que la figure (4.17), pour $N = 14$. 93

5.1 Différence entre les énergies fondamentales approximée et exacte en fonction du remplissage de la couche et pour une constante de couplage $g = 1.0$. 104

5.2 La variance du nombre de particules SCQRPA et BCS en fonction du remplissage de la couche et pour une constante de couplage $g = 1.0$. 105
5.3 Energies d'excitations SCQRPA en fonction du remplissage de la couche et pour une constante de couplage $g = 1.0$. 105
5.4 Energies d'excitation exactes et SCQRPA en fonction de la constante de couplage g, pour un nombre de particule $N = 2$ 106
5.5 Même quantités que la figure (5.4), pour $N = 10$ 106
5.6 Même quantités que la figure (5.4), pour $N = 14$ 107
5.7 Même quantités que la figure (5.4), pour $N = 22$ 107
5.8 Energies d'excitations SCQRPA^2 en fonction du remplissage de la couche et pour une constante de couplage $g = 1.0$. 111

1.1 Bandes du spectre de l'énergie fondamentale avec $\alpha = 3$ et $N = 30$. Chaque bande correspond à un x différent. 119

3.1 Spectre de bande de l'énergie fondamentale pour $\alpha = 3$, $N = 30$ comme fonction de l'interaction $x = G\sqrt{\frac{N}{\alpha}}$. 130
3.2 Energie de l'état fondamental absolu E_L^0 dans la zone sphérique en fonction de la constante de couplage réduite x. 132
3.3 Energie de l'état fondamental absolu E_L^0 dans la zone déformée en fonction de la constante de couplage réduite x. 133
3.4 Agrandissement de la courbe de l'énergie de l'état fondamental (au voisinage du point de transition). 133
3.5 Energies d'excitation ΔE_{-1} en fonction de la constante de couplage réduite x. . . . 135
3.6 Energies d'excitation ΔE_{+1} en fonction de la constante de couplage réduite x. . . . 135
3.7 Comparaison entre l'énergie d'excitation $(E_{L+1}^0 - E_{L-1}^0)/2$ avec la contrainte de la SCRPA(4), puis la contrainte de la SCRPA(6), puis la contrainte de la RPA. A chaque variation de la courbe exacte, les valeurs propre de l'opérateur P sont indiquées. 136
3.8 Energies d'excitation ΔE_{+1}, $\Delta E_L = E_L^1 - E_L^0$ et les valeurs propres Ω_2 de la SCRPA(6), la SCRPA(4) et la RPA en fonction de la constante de couplage réduite x. 136
3.9 Energies d'excitation du mode mou (spurieux) en fonction de la constante de couplage réduite x. 137
3.10 Energie d'excitation ΔE_{+2} et les valeurs propres Ω_3 de la SCRPA(6) et de la RPA en fonction de la constante de couplage réduite x. 138
3.11 La différence $[N_b - N_b^{\text{exact}}]$, calculée avec les méthodes SCRPA(6), SCRPA(4), RPA standard et champ moyen, en fonction de la constante de couplage réduite x. . . . 139
3.12 La variance de l'opérateur de symétrie P en fonction de la constante de couplage réduite x. 139

Liste des tableaux

4.1 Les résultats de l'énergie fondamentale (en unité arbitraire) comme fonction de la variable $V = \frac{g\Omega}{2\epsilon}$, pour un nombre de particules $N = 20$. Le spin de chaque niveau est $J = 19/2$. 94

3.1 Energies fondamentales absolues exactes, E^0_L, pour différentes valeurs de la constante de couplage réduite, x. Pour chaque valeur de x, on donne aussi, les plus basses énergies d'excitation avec $L = L \pm 1$, $\Delta E_{\pm 1} = E^0_{L\pm 1} - E^0_L$, et $L = L \pm 2$, $\Delta E_{\pm 2} = E^0_{L\pm 2} - E^0_L$, et le premier niveau excité $\Delta E_L = E^1_L - E^0_L$. 131

3.2 Energies fondamentales absolues exacte, SCRPA(6), SCRPA(4) et RPA pour différentes valeurs de la constante de couplage réduite x. 134

Chapitre 1

Introduction

En physique nucléaire, la détermination des propriétés statiques et dynamiques du noyau conduit à résoudre le problème engendré par la méthode des équations du mouvement (EMM) (Row70). Cependant, puisque le noyau constitue un problème à N corps, la solution exacte de la méthode EMM est non triviale. La résolution exacte des équations de la méthode EMM nécessite un traitement rigoureux des corrélations. Le traitement des corrélations dans les systèmes à plusieurs particules en mécanique quantique est un sujet ardu et constitue un champ de recherche très actif. De plus, la complexité du système nucléaire entraîne que l'approche utilisée dépend autant de notre capacité à résoudre le problème que du type de propriétés que l'on cherche à étudier. Par conséquent, nous introduisons des approximations afin de construire une théorie qui reproduit telles ou telles propriétés physiques du noyau. Le premier niveau d'approximation pour étudier le noyau consiste à utiliser l'image d'un ensemble de fermions indépendants en mouvement dans un potentiel moyen à un corps créé par eux-mêmes. Il s'agit de l'approximation de champ moyen (méthode Hartree-Fock) (Har28; Foc30) suggérée par la possibilité de comprendre certaines propriétés du noyau à l'aide d'une structure en couches pour les nucléons, analogue à la structure en couches électroniques de l'atome. L'approximation de champ moyen constitue alors une solution de la méthode EMM ne tenant compte que des corrélations à une particule. Cette idée provient en fait de la découverte d'une surstabilité vis-à-vis de l'énergie de séparation d'un nucléon des noyaux ayant un nombre particulier de neutrons et/ou de protons : 2, 8, 20, ... A l'instar des gaz rares qui possèdent des couches électroniques complètes, ces noyaux "magiques", ou "doublement magiques", sont interprétés comme des noyaux à couches de neutrons et/ou protons complètes ou totalement remplies. Dans ce cas, seules les corrélations particule-trou, qui sont de longue portée, sont prise en compte. De plus, le spectre d'excitations individuelles de ces noyaux présente une énergie de gap (bande interdite) assez grande. Cependant, dans les noyaux ayant des couches partiellement remplies (couches ouvertes) l'approximation de champ moyen cesse d'être valable. En effet, dans ce cas l'énergie du gap peut être très petite et il peut se trouver qu'au voisinage du niveau de Fermi un groupe de niveaux quasi-dégénérés où seulement quelques uns sont occupés et par conséquent l'approximation HF ne marche plus ; il faut alors développer une autre méthode plus appropriée.

En fait, au début des années cinquante, le noyau est considéré comme une sphère contenant un nombre bien défini de constituants (neutrons et protons). La théorie utilise alors le modèle de la goutte liquide, où le noyau est toujours sphérique dans son état fondamental. C'est à cette époque que les expérimentateurs ont mis en évidence l'existence de bandes de rotation. Ce phénomène n'était pas prévu par la théorie, puisque la mécanique quantique ne permet pas de voir tourner un objet sphérique. La déduction logique de l'observation expérimentale de ces bandes de rotations nucléaires fut la possibilité que le noyau puisse être déformé dans son état fondamental. La déformation et donc la rotation nucléaire étant admise, un nouveau domaine d'études s'ouvrait. Face à cette nouvelle vision de la structure nucléaire, les modèles théoriques se sont adaptés. Dès 1955, Bohr et Mottelson (BM55) ont fourni de bons arguments pour expliquer qu'une partie de l'interaction résiduelle, négligée jusque là, permettait d'introduire des corrélations supplémentaires.

L'interaction résiduelle introduit notamment des corrélations de paires, qui impliquent que l'approximation de particules indépendantes n'est plus valide. C'est à ce stade qu'apparaît pour la première fois la notion d'appariement nucléaire, fortement relié à la fluidité et à la superfluidité nucléaire.

Afin d'introduire les corrélations d'appariement dans le formalisme, tout en conservant la notion d'éléments indépendants, les théoriciens se sont intéressés à la méthode BCS (BCS57) développée par Bardeen, Cooper et Schrieffer en physique du solide en 1957 pour traiter la supraconductivité. La méthode BCS introduit la notion de quasi-particules indépendantes soumises à un champ moyen. Cette méthode est un cas particulier de la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) (RS80). La méthode BCS, tout comme la méthode HF, qui sont des approches de champ moyen relatives à des quasi-particules et des particules indépendantes respectivement, brisent un certain nombre de symétries du Hamiltonien du noyau; on parle alors de brisure spontanée de symétrie au niveau du champ moyen. Nous arrivons alors à la notion de transition de phase. Bien que les méthodes de type champ moyen présentées jusqu'ici permettent d'étudier le noyau dans ses différentes phases, elles négligent les corrélations dans l'état fondamental. Par conséquent, avec ces approximations nous ne pouvons pas étudier les propriétés des états excités ainsi que leur influence, sous l'effet des corrélations, sur les états fondamentaux.

Dans le but d'aller au-delà des approximations de champ moyen, la méthode RPA (Random Phase Approximation) (RS80) est utilisable. Au départ, cette approximation, qui est aussi de type champ moyen, était construite pour tenir compte des corrélations du type deux particules-deux trous ($2p-2h$) dans l'état fondamental. Comme on utilise le vide HF pour l'évaluation des valeurs moyennes (approximation quasi-bosons), cette méthode viole le principe de Pauli et par suite surestime les corrélations. De plus, cette méthode est une approximation incohérente. En effet, dans la méthode RPA standard (on dit encore RPA-HF), on commence par inclure les corrélations dans l'état fondamental et du fait de l'impossibilité de poursuivre les calculs on remplace le vide corrélé par un vide HF. De plus, en théorie de champ moyen, et au-delà, quand un système perd spontanément une de ses symétries, la méthode RPA standard s'effondre à la transition de phase. Cela peut être du à une incohérence dans cette méthode, au moins pour les systèmes finis.

Afin, d'établir une solution des équations EMM autocohérente tenant compte des corrélations à ($2p-2h$) et qui aille au-delà des approximations de champ moyen, P. Schuck et J. Dukelsky ont proposé l'approximation RPA autocohérente (SCRPA) (DS90; DS91; DS96; SDR97; DHS00). Pour cela, il ont pris comme base de départ la méthode RPA. Celle-ci est la méthode la plus simple pour étudier, d'une manière cohérente, les propriétés des états excités ainsi que leur influence sur les états fondamentaux, par l'introduction d'opérateurs appelés opérateur d'excitation RPA, dont le vide représente l'état fondamental du système étudié. Ces opérateurs d'excitation sont construits à partir de combinaisons linéaires d'opérateurs de paires ($p-h$), et définissent le spectre en énergie. La plupart des théories microscopiques, qui tentent d'étudier les propriétés nucléaires et d'améliorer la RPA standard, sont basées sur la méthode des équations EMM.

Dans une première partie nous allons exposer en détail les fondements des méthodes de type champ moyen et au-delà, à savoir, les méthodes HF, BCS, RPA et SCRPA. Ces méthodes de résolution des problèmes à N corps seront la base de tous nos développements numériques. Nous commencerons par la présentation de la méthode HF qui est une approximation de champ moyen à une particule, ensuite, nous nous intéresserons à la méthode BCS, qui est aussi une approximation de champ moyen mais à une quasi-particule. Ensuite, nous exposerons en détail les fondements de la méthode RPA, et nous discuterons les défauts de la méthode RPA standard. Pour surmonter les difficultés et les défauts rencontrés, nous développerons la méthode SCRPA qui est totalement self-consistante. A la fin de cette partie, nous aborderons la question de la brisure et la restauration de symétrie au niveau champ moyen, pour les systèmes finis et infinis.

Le phénomène d'appariement qui va être traité à travers les modèles d'appariement à deux niveaux et à un niveau (RS80), fera l'objet de la deuxième partie. Nous discuterons en détail l'application de la version quasi-particule de la méthode SCRPA (SCQRPA) à ces deux modèles. Au départ, nous aborderons le cas du modèle à deux niveaux, où nous montrerons que nous avons obtenu, en comparaison avec d'autres méthodes, de très bons résultats pour toutes les observables physiques mesurées dans les deux phases du modèle. Ensuite, nous entamerons l'étude

du modèle de la séniorité, qui malgré sa simplicité, permet de fournir beaucoup d'informations sur l'application de la méthode SCQRPA. Dans ce modèle, nous montrerons que, grâce à la souplesse de notre méthode, on peut contrôler correctement les fluctuations et donc les corrélations dans l'état fondamental et aussi les états excités.

Dans une dernière partie, nous étudierons cette fois la méthode SCRPA dans un modèle autorisant l'interaction des champs de fermions avec un champ de boson. Un modèle soluble qui contient une telle interaction a été proposé par Schütte et Da-Providencia (SD77). Ce modèle, qui peut être vu comme une extension du modèle de Lipkin à deux niveaux, présente une transition de phase de type Nambu-Goldstone. En effet, suivant la valeur de la constante de couplage, le modèle peut présenter des transitions, ce qui permet par exemple l'étude de la condensation des bosons. Nous allons donc adopter le formalisme à ce cas de figure de bosons et fermions en interaction. Cela n'ira pas sans problème et notamment la nature du mode de Goldstone laissera quelques questions en suspens. Dans l'ensemble nous obtienderons cependant aussi de bons résultats avec la SCRPA dans ce modèle.

Première partie

Les approximations du champ moyen et au-delà

Introduction

Dans cette partie, nous nous intéresserons à la présentation des différentes méthodes de type champ moyen qui vont être considérées dans notre travail. Nous commencerons par la présentation de la méthode de Hartree-Fock qui constitue une méthode de type champ moyen à une particule. Cette méthode permet la prise en compte des corrélations de type $(p-h)$, qui sont de longue portée. Ensuite, nous présenterons la méthode BCS, qui est une généralisation de la méthode HF autorisant la prise en compte des corrélations de type $(p-p)$ ou $(h-h)$ (ces corrélations sont de courte portée) et nous introduirons la notion de quasi-particule. Cette méthode est une approximation de type champ moyen pour les quasi-particules. Bien que ces deux méthodes résolvent les équations de la méthode EMM, elles ne permettent pas d'inclure les corrélations dans l'état fondamental considéré. Pour remédier à cette lacune, nous considérerons les solutions au-delà du champ moyen standard de la méthode EMM. Dans un premier temps, nous commencerons par la présentation de la méthode RPA standard qui constitue une méthode de type champ moyen à deux particules (c'est-à-dire champ moyen des fluctuations quantiques). Comme nous le verrons et nous le discuterons en détail par la suite, cette méthode n'est pas cohérente. En fait, puisqu'elle ne fonctionne que conjointement avec le vide HF, elle viole le principe de Pauli et présente une surestimation des corrélations dans l'état fondamental RPA. Dans un deuxième temps, nous présenterons la méthode RPA self-consistante. Cette méthode permet la prise en compte des corrélations à deux particules d'une manière cohérente. Nous montrerons quelle constitue une méthode de type champ moyen des fluctuations quantiques, et c'est cette méthode que nous adopterons pour mener notre étude. Dans le dernier chapitre de cette partie, nous discuterons la notion de la brisure spontanée de symétrie au niveau des approximations de type champ moyen, dans les systèmes finis et infinis. Enfin, nous discuterons le problème de la restauration de symétrie dans les systèmes finis et nous présenterons la technique de projection. En particulier, nous développerons l'approximation de Cranking.

Chapitre 1

Approximation du champ moyen

L'approximation du champ moyen joue un rôle essentiel dans l'étude des problèmes à N corps. Elle consiste à transformer l'étude de la dynamique d'un système de N particules en interaction à l'étude de la dynamique de N systèmes à une particule qui se déplace dans un potentiel moyen crée par les autres particules. Le potentiel moyen crée par les $(N-1)$ particules se dérive grâce au principe variationnel de Ritz où les fonctions d'onde d'essai sont des déterminants de Slater. Dans un premier paragraphe, nous donnerons des généralités sur le principe variationnel. Ensuite, nous présenterons l'approximation Hartree-Fock (HF) (Har28; Foc30).

1.1 Méthode variationnelle

Tout d'abord, commençons par montrer que l'équation de Schrödinger exacte :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{1.1}$$

est équivalente à l'équation variationnelle :

$$\delta E[\psi] = 0 \tag{1.2}$$

où $E[\psi]$ est l'énergie de l'état ψ donnée par :

$$E[\psi] = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \tag{1.3}$$

Pour cela nous partons de la définition même de l'énergie (1.3) ; nous opérons une variation infinitésimale et nous obtenons :

$$\langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle + \langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle = 0. \tag{1.4}$$

Si nous effectuons le changement $|\delta\psi\rangle \to i|\delta\psi\rangle$, nous en déduisons :

$$-i\langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle + i\langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle = 0. \tag{1.5}$$

A partir de (1.4) et (1.5), nous obtenons :

$$\langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle = \langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle = 0, \tag{1.6}$$

ce qui est bien équivalent à (1.1) puisque $|\delta\psi\rangle$ est arbitraire. Ainsi, résoudre une équation de Schrödinger revient à minimiser la valeur moyenne du Hamiltonien concerné. De plus, pour n'importe quel état dynamique d'un système, la valeur moyenne de son énergie est supérieure ou égale à l'énergie propre de son état fondamental :

$$E[\psi] \geqslant E_0. \tag{1.7}$$

Par conséquent, nous pouvons trouver l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ en minimisant la fonctionnelle $E[\psi]$. Le succès de la méthode dépend d'un choix judicieux de l'espace des fonctions d'essai : ce choix doit être guidé par la physique du problème et conduire à des calculs faisables. Tant que la vraie fonction n'est pas dans cet ensemble, la solution minimale n'est plus la fonction propre exacte, mais seulement une approximation. En ce qui concerne les états excités, on peut procéder de la même façon, par exemple pour le premier état excité, il faut travailler dans le sous-espace entièrement orthogonal à $|\psi_0\rangle$.

1.2 L'approximation de Hartree-Fock

1.2.1 Fonctions d'onde d'essai et énergie de Hartree-Fock

Fonctions d'onde d'essai

La méthode de Hartree-Fock suppose l'existence d'un potentiel moyen monoparticulaire, appellé potentiel de Hartree-Fock. Comme approximation du vrai Hamiltonien d'un système à Ω particules en interaction, le Hamiltonien HF s'écrit :

$$H^{HF} = \sum_{i=1}^{\Omega} h(i), \tag{1.8}$$

où l'indice $i = \{\vec{r}_i, s_i, t_i\}$ représente les coordonnées d'espace, de spin et éventuellement d'isospin de la particule i. L'état fondamental correspondant aux Ω particules indépendantes dans cette approximation est un déterminant de Slater :

$$|\mathrm{HF}\rangle = |\Phi(1, \ldots, \Omega)\rangle = \prod_{k=1}^{\Omega} a_k^\dagger |-\rangle, \tag{1.9}$$

où $|-\rangle$ est le vide nu. Dans cet état, les opérateurs fermioniques $a_k^\dagger$ et a_k correspondent aux fonctions d'onde monoparticulaires φ_k, qui sont elles mêmes fonctions propres du Hamiltonien à une particule h :

$$h(i)\varphi_k = \epsilon_k \varphi_k(i). \tag{1.10}$$

L'état propre de plus basse énergie du Hamiltonien H^{HF} est obtenu en remplissant les Ω niveaux les plus bas dans l'état $|\mathrm{HF}\rangle$. Dans ce qui suit, on va caractériser les niveaux occupés dans l'état $|\mathrm{HF}\rangle$ par les lettres i, j (états de trous) et les niveaux vides par m, n (états de particules).

Les fonctions d'onde $\varphi_k(\vec{r}, s, t)$ sont une représentation dans l'espace des coordonnées de l'état propre $|k\rangle$ du Hamiltonien monoparticulaire h. Très souvent, on travaille dans l'espace de configuration sous-tendu par un ensemble de fonctions d'onde monoparticulaires complet et orthogonal $\{\chi_l\}$. La fonction φ_k peut être développée dans cette base :

$$\varphi_k = \sum_l D_{lk} \chi_l. \tag{1.11}$$

Si pour chaque fonction d'onde χ_l on définit les opérateurs de création et d'annihilation de fermion $c_l^\dagger$ et c_l correspondants, on peut d'une manière similaire exprimer les opérateurs $a_k^\dagger$ en fonction de $c_l^\dagger$:

$$a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger. \tag{1.12}$$

Puisque les deux ensembles $\{\varphi_k\}$ et $\{\chi_l\}$ sont complets et orthogonaux, la transformation D doit être unitaire :

$$D^\dagger D = D D^\dagger = 1. \tag{1.13}$$

Ce qui permet aux opérateurs $(c_l^\dagger, c_l)$ de préserver les relations de commutation des fermions.

Il est souvent plus commode de représenter le déterminant de Slater $|\Phi\rangle$ par sa matrice densité à une particule :

$$\rho_{ll'} = \langle\Phi|c_{l'}^\dagger c_l|\Phi\rangle. \tag{1.14}$$

Tenant compte de (1.12) et (1.13), on obtient :

$$\rho_{ll'} = \sum_{kk'} D_{lk} D^*_{l'k'} \langle\Phi|a_{l'}^\dagger a_l|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^{\Omega} D_{li} D^*_{l'i}, \tag{1.15}$$

puisque ρ est diagonale dans la base $\{a_k^\dagger, a_k\}$ avec les valeurs propres (les nombres d'occupations) 1 pour $i \leqslant \Omega$ (trous) et 0 pour $i > \Omega$ (particules). La trace de la matrice densité ρ est égale au nombre de particules. Comme on peut montrer que la correspondance entre le déterminant de Slater et sa densité monoparticulaire ρ est bijective, les densités monoparticulaires ρ du déterminant de Slater sont caractérisées par le fait qu'elles ont seulement pour valeur propre 0 ou 1, ainsi :

$$\rho^2 = \rho. \tag{1.16}$$

Donc, on peut conclure que ρ est un projecteur dans l'espace des fonctions d'onde monoparticulaires sur le sous-espace sous-tendu par les fonctions d'onde de trous φ_i.

De la même manière, on peut définir un projecteur σ

$$\sigma = 1 - \rho \tag{1.17}$$

dans le sous-espace sous-tendu par les fonctions d'ondes de particules φ_m.

Nous venons de présenter les bases du calcul dans l'approximation Hartree-Fock ; définissons maintenant la méthode Hartree-Fock : *nous utilisons un ensemble de déterminants de Slater* $\{\Phi\}$ *de la forme (1.9), qui sont constitués de* Ω *fonctions d'onde monoparticulaires arbitraires mais orthogonales* φ_i*, comme fonctions d'onde d'essai, et l'on cherche à minimiser l'énergie dans cet ensemble.*

Energie de Hartree-Fock

Avant de pouvoir effectuer la variation qui nous permettra de déterminer la fonction d'onde HF notée Φ, nous devons calculer l'énergie de Hartree-Fock donnée par :

$$E^{HF} = \langle\Phi|H|\Phi\rangle \tag{1.18}$$

En seconde quantification, ce Hamiltonien, utilisé habituellement dans le traitement des problèmes à N corps, s'écrit à l'aide des opérateurs de base $(c_l^\dagger, c_l)$ comme suit :

$$H = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^\dagger c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3}, \tag{1.19}$$

où $\bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4}$ est le potentiel à un corps anti-symétrique :

$$\bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} = v_{l_1 l_2 l_3 l_4} - v_{l_1 l_2 l_4 l_3}. \tag{1.20}$$

En appliquant le théorème de Wick, on peut exprimer l'énergie HF (1.17) comme une fonctionnelle de la densité monoparticulaire :

$$\begin{aligned} E^{HF}[\rho] &= \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \langle\Phi|c_{l_1}^\dagger c_{l_2}|\Phi\rangle + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} \langle\Phi|c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3}|\Phi\rangle \\ &= \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \rho_{l_2 l_1} + \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_3 l_1} \bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} \rho_{l_4 l_2} \qquad (1.21) \\ &= Tr(t\rho) + \frac{1}{2} Tr_1 Tr_1(\rho \bar{v} \rho) \qquad (1.22) \end{aligned}$$

Puisque l'équation (1.22) est indépendante de la base, on peut donc l'utiliser pour donner une expression de l'énergie HF dans la base HF $\{\varphi_k\}$ dans laquelle ρ est diagonale avec les valeurs propres 0 et 1 :

$$E^{HF} = \sum_{i=1}^{\Omega} t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\Omega} \bar{v}_{ij,ij}. \tag{1.23}$$

1.2.2 Les équations de Hartree-Fock

Pour déterminer la base HF, nous devons minimiser la fonctionnelle énergie (1.22) par rapport à toutes les densités ρ, avec la condition que $\rho^2 = \rho$. Ceci est équivalent à la minimisation de (1.22) dans l'espace des déterminants de Slater. Puisque la densité à laquelle on ajoute une petite variation est aussi un projecteur :

$$(\rho + \delta\rho)^2 = \rho + \delta\rho. \tag{1.24}$$

Nous négligeons les termes quadratiques en $\delta\rho$ et on obtient :

$$\delta\rho = \rho\delta\rho + \delta\rho\,\rho. \tag{1.25}$$

Dans la base HF, où la densité est diagonale, cela signifie que les éléments de matrice particule-particule (pp) et trou-trou (hh) de $\delta\rho$ doivent être nuls :

$$\rho\delta\rho = \sigma\,\delta\rho\,\sigma = 0. \tag{1.26}$$

Par conséquent, pour s'assurer que nous restons dans l'ensemble des déterminants de Slater, nous pouvons ne tenir compte que des variations $\delta\rho_{mi}$ et $\delta\rho_{im}$ des éléments de matrice (ph) et (hp) de la matrice densité ρ dans la base HF.

La variation de l'énergie (1.21) est alors donnée par :

$$\delta E = E[\rho + \delta\rho] - E[\rho] = \sum_{kk'} h_{kk'}\delta\rho_{kk'} = \sum_{mi} h_{mi}\delta\rho_{im} + c.c. \tag{1.27}$$

où la matrice hermitique h est définit par :

$$h_{kk'} = \frac{\partial E^{HF}[\rho]}{\partial \rho_{kk'}}. \tag{1.28}$$

Tenant compte de (1.21), on peut écrire :

$$h = t + \Gamma, \tag{1.29}$$

où Γ est le potentiel "self-consistant" définit par :

$$\Gamma_{kk'} = \sum_{ll'} \bar{v}_{kl'k'l}\rho_{ll'}. \tag{1.30}$$

Comme $\delta\rho_{mi}$ peut prendre des valeurs arbitraires, à partir de (1.27) nous pouvons vérifier que la condition $\delta E = 0$ pour la solution HF signifie que les éléments de matrice (ph) de h doivent être nuls :

$$h_{mi} = t_{mi} + \sum_{j=1}^{\Omega} \bar{v}_{mjij} = 0, \quad (\text{pour } i \leqslant \Omega,\ m > \Omega). \tag{1.31}$$

Dans la base où ρ est diagonale, h ne mélange pas les états particules et trous de la matrice densité monoparticulaire ρ et l'équation (1.31) est équivalente à :

$$[h, \rho] = [t + \Gamma[\rho], \rho] = 0. \tag{1.32}$$

Ceci est une équation non linéaire ; elle montre que h et ρ peuvent être diagonalisés simultanément. Ainsi, la base Hartree-Fock est définit comme étant celle où h et ρ sont diagonales en même temps. De plus, dans cette base, l'équation (1.32) nous mène au problème aux valeurs propres suivant :

$$h_{kk'} = t_{kk'} + \sum_{i=1}^{\Omega} \bar{v}_{kik'i} = \epsilon_k \delta_{kk'}. \tag{1.33}$$

Par suite, puisque cette base est donnée par la transformation unitaire D (1.12), on obtient finalement l'ensemble des équations de Hartree-Fock :

$$\sum_{l'} h_{ll'} D_{l'k} = \sum_{l'} \left(t_{ll'} + \sum_{i=1}^{\Omega} \sum_{pp'} \bar{v}_{lp'l'p} D_{pi} D^*_{p'i} \right) D_{l'k} = \epsilon_k D_{lk}. \tag{1.34}$$

Les équations HF représentent un problème aux valeurs propres hermitique et non linéaire. La non linéarité de ces équations vient du fait que la matrice h dépend de la densité ρ, qui dépend des fonctions d'onde monoparticulaires φ_k (1.11), qui peuvent être déterminées à partir des coefficients D_{lk}, solutions des équations HF. Généralement, pour résoudre un tel ensemble d'équations non linéaires on procède par itération. Nous choisissons d'abord un ensemble de fonctions d'onde d'essai puis nous calculons la matrice densité puis nous construisons le Hamiltonien HF ; nous le diagonalisons en résolvant l'équation (1.34) puis à partir des solutions D_{lk} nous construisons les fonctions d'onde (1.11) ; nous obtenons ainsi un nouvel ensemble de fonctions d'onde. Celles-ci servent à déterminer la densité puis le Hamiltonien HF et ainsi de suite jusqu'à la convergence.

Ainsi, suivant la méthode de Hartree-Fock, nous avons construit un Hamiltonien monoparticulaire :

$$\begin{aligned} H^{HF} &= \sum_{kk'} h_{kk'} a^\dagger_k a_{k'} = \sum_{kk'} (t_{kk'} + \Gamma_{kk'}) a^\dagger_k a_{k'} \\ &= \sum_{kk'} (t_{kk'} + \sum_{j=1}^{\Omega} \bar{v}_{kjk'j}) a^\dagger_k a_{k'} = \sum_k \epsilon_k a^\dagger_k a_k \end{aligned} \tag{1.35}$$

dont l'état fondamental est un déterminant de Slater $|\mathrm{HF}\rangle$ correspondant à une énergie E stationnaire pour des petites variations de la fonction d'onde. En plus de l'énergie cinétique, le Hamiltonien h contient un champ self-consistant Γ dépendant de la densité nucléaire ; ce champ est monoparticulaire et représente la moyenne de toutes les interactions à deux corps. Pour résumer, le Hamiltonien HF décrit le mouvement d'une particule dans un potentiel moyen statique qui résulte de l'interaction moyenne de cette particule avec les autres particules du système.

La méthode HF fournit une bonne approximation de l'état fondamental d'un noyau lorsque son spectre individuel déduit de l'équation (1.10) présente un large gap en énergie. Les excitations élémentaires construites à partir de la fonction HF de l'état fondamental correspondent au déplacement d'une particule depuis un état occupé vers un état vide autour du niveau de Fermi. L'énergie d'excitation est d'autant plus importante que le gap dans le sepctre individuel autour du niveau de Fermi est grand. C'est le cas des noyaux magiques. Dans un tel cas, l'état fondamental HF constitue une bonne approximation du vrai fondamental du noyau. Dans le cas contraire où le gap est petit, comme pour les noyaux à couches ouvertes, l'état fondamental HF est quasi-dégénéré avec un certain nombre d'états excités $(p-h)$ qui lui seront fortement couplées par la partie de courte portée de l'interaction. L'approximation HF est alors bien moins adaptée, et il devient nécessaire d'aller plus loin au moyen de la prise en compte de tout ou partie de l'interaction.

1.3 Conclusion

En conclusion, la méthode de Hartree-Fock consiste à approcher la dynamique d'un système par le mouvement de particules indépendantes. L'état du système est un déterminant de Slater et

le Hamiltonien HF est un Hamiltonien monoparticulaire. De plus, puisque la base HF est définie à une transformation unitaire près entre états de particule d'une part et états de trou d'autre part, alors seules les corrélations de type $(p-h)$ sont prises en compte ; ces corrélations sont celles liées à la partie de longue portée de l'interaction. Le cas des corrélations $(p-p)$, qui correspondent à la partie de courte portée de l'interaction fera l'objet du prochain chapitre.

Chapitre 2

Corrélations d'appariement dans les noyaux

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté la méthode de Hartree-Fock (Har28; Foc30). Nous rappelons que dans cette méthode nous ne tenons compte que des corrélations de longue portée à savoir les corrélations $(p-h)$. Or, il est bien connu que pour la superfluidité dans les noyaux ou la supraconductivité dans les solides, un autre type de corrélations joue un rôle très important. Dans le cas de la superfluidité et de la supraconductivité, les corrélations $(p-p)$ apparaissant dans le système sont celles qui sont à l'origine de la transition de phase (fluide/conducteur normal)-(superfluide/supraconduteur). Par exemple, dans le cas des noyaux à couches ouvertes, les corrélations $(p-p)$, à savoir les corrélations proton-proton ou neutron-neutron, sont responsables de la brisure spontanée de la symétrie "nombre de particules". L'étude de la brisure spontanée de symétrie ainsi que la superfluidité fera l'objet des chapitres qui suivent.

Nous présentons maintenant une méthode qui tient compte des corrélations $(p-p)$. Cette méthode est inspirée de la théorie BCS en physique des solides (BCS57). Tout comme la méthode de Hartree-Fock, cette méthode qu'on appellera méthode BCS ne va pas donner une solution exacte pour le problème aux valeurs propres, mais peut être établie à partir d'un principe variationnel. Par conséquent, nous suivrons formellement la même démarche que dans la méthode Hartree-Fock : nous choisissons une famille d'états d'essai et nous minimisons l'énergie. Ceci nous conduit aussi à introduire la notion de quasi-particule.

2.1 L'état fondamental BCS

Comme nous l'avons vu dans la méthode de Hartree-Fock, plusieurs propriétés d'un noyau ou d'un solide peuvent être décrites en termes d'un modèle de particules indépendantes se déplaçant dans un potentiel de champ moyen dont la dépendance spatiale suit étroitement la distribution de la matière. Dans le cas des noyaux avec des couches ouvertes (partiellement remplies) par exemple, nous trouvons des corrélations supplémentaires entre ces particules. Pour tenir compte de ce nouveau type de corrélations, nous introduisons à l'aide de la transformation de Bogoliubov la notion de quasi-particule. L'idée est maintenant de voir le système de particules en interaction, comme étant un système de quasi-particules indépendantes en mouvement dans un potentiel moyen qui est dans ce cas le potentiel d'appariement ou de pairing. Suivant la théorie BCS (BCS57), l'état d'essai d'un noyau (pair-pair) par exemple, peut être choisi sous la forme suivante :

$$|\mathrm{BCS}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger)|-\rangle \tag{2.1}$$

où, $|-\rangle$ est un déterminant de Slater (le "coeur" du noyau), u_k et v_k sont des paramètres complexes. Dans la définition (2.1) le produit porte sur toutes les valeurs de k dans la moitié de l'espace de

configuration comme indiqué par $k > 0$; donc, pour chaque état $k > 0$ il existe un état renversé par rapport au temps $\bar{k} < 0$ tel que l'état $\{k, \bar{k}\}$ engendre tout l'espace monoparticulaire. Ainsi, la propriété remarquable du choix de la famille des états d'essai (2.1) est que les états à une particule k et $\bar{k}$ sont regroupés par paires, ils sont simultanément occupés ou non occupés. Les paramètres u_k et v_k sont à déterminer à l'aide du principe variationnel ; ils ne sont pas indépendants puisque la normalisation de l'état (2.1) impose qu'ils satisfassent la relation :

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1. \tag{2.2}$$

De plus $|v_k|^2$ et $|u_k|^2$ représentent la probabilité qu'un certain état $\{k, \bar{k}\}$ soit occupé ou non, respectivement. Bien que l'état BCS donné par (2.1) constitue un très bon choix pour étudier la superfluidité ou la supraconductivité puisqu'il permet le groupement des particules en paires, il présente une caractéristique dont on pourrait attendre des difficultés : le nombre de particules correspondant à cet état n'est pas fixé (RS80). L'état BCS (2.1) est la superposition d'états avec un nombre de particules différent, il comprend un terme à zéro particule et des termes à deux particules, à quatre particules, ...etc. Ainsi, la simplicité de la prise en compte des corrélations d'appariement dans la méthode BCS (dans la théorie de champ moyen de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) en général) se traduit par l'abandon d'une quantité conservée dans le système, ou autrement dit par l'appartition d'une brisure spontanée de symétrie. Au même titre que l'apparition du champ self-consistant Γ dans la méthode HF caractérise la brisure spontanée de symétrie de translation, la violation du bon nombre de particule (nucléons) engendre l'apparition du champ d'appariement Δ (Sch86). Par conséquent, lors de l'application du principe variationnel on doit introduire un paramètre de Lagrange (RS80) qui fixe le nombre de particules variable à sa valeur exacte.

Dans un solide ou dans le noyau, puisque dans la méthode BCS le nombre de particules n'est pas fixe, un paquet d'ondes (2.1) comportant initialement un petit nombre de particules peut être énergétiquement favorisé et en conséquence envahir des domaines macroscopiques, à savoir tout le solide : c'est la transition à la superfluidité.

Dans la méthode Hartree-Fock nous avons transformé l'ensemble des opérateurs fermioniques $\{a^\dagger\}$ en un ensemble $\{c^\dagger\}$ suivant la transformation unitaire :

$$a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger. \tag{2.3}$$

Dans la théorie BCS, nous introduisons une transformation linéaire, unitaire ; c'est la transformation de Bogoliubov (RS80) qui mélange les opérateurs de création et d'annihilation de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \alpha_k^\dagger &= u_k a_k^\dagger - v_k a_{\bar{k}}, \\ \alpha_{\bar{k}}^\dagger &= u_k a_{\bar{k}}^\dagger + v_k a_k. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Nous obtenons donc des nouveaux opérateurs pour les nouveaux fermions qui sont les quasi-particules ; par suite cette transformation préserve les règles d'anti-commutation :

$$\{\alpha_k, \alpha_{k'}\} = \{\alpha_k^\dagger, \alpha_{k'}^\dagger\} = 0, \ \{\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}, \tag{2.5}$$

où nous avons utilisé la convention usuelle :

$$u_{\bar{k}} = u_k > 0; \ v_{\bar{k}} = -v_k < 0; \ k > 0. \tag{2.6}$$

Finalement, nous pouvons vérifier facilement que l'état (2.1) peut être exprimé en fonctions des opérateurs quasi-particules α_k sous la forme d'un déterminant de Slater :

$$|\mathrm{BCS}\rangle = \prod_{k \gtrless 0} \alpha_k |-\rangle \tag{2.7}$$

et que :

$$\alpha_k |\mathrm{BCS}\rangle = 0, \ \forall k \tag{2.8}$$

ce qui montre que l'état $|\mathrm{BCS}\rangle$ constitue le vide de quasi-particules et ne prend en compte que les paires de fermions, autrement dit les corrélations de pairing. Finalement, les états à une quasi-particule sont donnés par :

$$\begin{aligned} \alpha^\dagger_{k_1}|\mathrm{BCS}\rangle &= a^\dagger_{k_1}\prod_{k\neq k_1}(u_k + v_k a^\dagger_k a^\dagger_{\bar{k}})|-\rangle \\ \alpha^\dagger_{\bar{k}_1}|\mathrm{BCS}\rangle &= a^\dagger_{\bar{k}_1}\prod_{k\neq k_1}(u_k + v_k a^\dagger_k a^\dagger_{\bar{k}})|-\rangle. \end{aligned} \tag{2.9}$$

et donc l'énergie E_{k_1} d'une quasi-particule est donnée par :

$$E_{k_1} = \langle \mathrm{BCS}|\alpha_{k_1} H' \alpha^\dagger_{k_1}|\mathrm{BCS}\rangle - \langle \mathrm{BCS}|H'|\mathrm{BCS}\rangle. \tag{2.10}$$

2.2 Les équations BCS

Comme nous venons de le voir à l'aide de la transformation de Bogoliubov nous avons obtenu une représentation de l'état d'essai de particules interagissant par paires en terme d'un gaz de quasi-particules sans interaction. Puisque cette transformation mélange les opérateurs de création et de destruction, le nombre de particules n'est pas conservé : on parle alors de brisure spontanée de la symétrie nombre de particules. Par conséquent, pour effectuer la minimisation de l'énergie, qui est équivalente à la résolution d'un problème aux valeurs propres comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, nous introduisons un paramètre de Lagrange qui fixe le nombre moyen de particules à sa valeur exacte.

Le Hamiltonien du système à N particules en interaction s'écrit en seconde quantification :

$$H = \sum_{k_1 k_2} t_{k_1 k_2} a^\dagger_{k_1} a_{k_2} + \frac{1}{4}\sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \bar{v}_{k_1 k_2, k_3 k_4} a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} a_{k_4} a_{k_3}. \tag{2.11}$$

L'opérateur nombre de particules $\hat{N}$ du système est donné par :

$$\hat{N} = \sum_{k>0}(a^\dagger_k a_k + a^\dagger_{\bar{k}} a_{\bar{k}}). \tag{2.12}$$

Pour calculer la valeur moyenne de l'opérateur nombre de particules (2.12) dans l'état BCS, on doit l'exprimer dans la représentation des quasi-particules. Ainsi, en utilisant la transformation de Bogoliubov (2.4), on peut écrire :

$$\begin{aligned} a^\dagger_k &= u_k \alpha^\dagger_k + v_k \alpha_{\bar{k}}, \\ a^\dagger_{\bar{k}} &= u_k \alpha^\dagger_{\bar{k}} - v_k \alpha_k, \end{aligned} \tag{2.13}$$

Par suite, on a :

$$\hat{N} = \sum_{k>0}\Big\{(u_k^2 - v_k^2)(\alpha^\dagger_k \alpha_k + \alpha^\dagger_{\bar{k}}\alpha_{\bar{k}}) + 2v_k^2 + u_k v_k(\alpha_k \alpha_{\bar{k}} - \alpha_{\bar{k}}\alpha_k + \alpha^\dagger_k \alpha^\dagger_{\bar{k}} - \alpha^\dagger_{\bar{k}}\alpha^\dagger_k)\Big\}. \tag{2.14}$$

De plus, en utilisant (2.8), on peut calculer la valeur moyenne de $\hat{N}$ dans l'état BCS, on obtient :

$$\langle \mathrm{BCS}|\hat{N}|\mathrm{BCS}\rangle = 2\sum_{k>0} v_k^2. \tag{2.15}$$

Comme on vient de le signaler, on doit fixer la valeur moyenne de l'opérateur nombre de particules à sa valeur exacte, ce qui se traduit par l'ajout du terme $-\mu\hat{N}$ au Hamiltonien (2.11) ; on aura donc à minimiser le Hamiltonien contraint H' donné par :

$$H' = H - \mu\hat{N} \tag{2.16}$$

où μ est le paramètre de Lagrange qui traduit la condition $N = \langle \mathrm{BCS}|\hat{N}|\mathrm{BCS}\rangle$. Il est interprété comme un potentiel chimique ou une énergie de Fermi puisqu'il représente la variation de l'énergie $E = \langle \mathrm{BCS}|H|\mathrm{BCS}\rangle$ par rapport à la variation du nombre de particules :

$$\mu = \frac{dE}{dN}. \tag{2.17}$$

Puisque la fonction d'onde BCS est complètement déterminée par les paramètres v_k et la condition (2.2), la minimisation de la valeur moyenne de H' :

$$\delta\Big(\langle \mathrm{BCS}|H'|\mathrm{BCS}\rangle\Big) = \delta\Big(\langle \mathrm{BCS}|H - \mu\hat{N}|\mathrm{BCS}\rangle\Big) = 0 \tag{2.18}$$

nous donne :

$$\left(\frac{\partial}{\partial u_k} + \frac{\partial v_k}{\partial u_k}\frac{\partial}{\partial v_k}\right)\langle \mathrm{BCS}|H'|\mathrm{BCS}\rangle = 0. \tag{2.19}$$

Après différentiation, on obtient finalement l'ensemble des équations BCS :

$$2\tilde{\epsilon}_k u_k v_k + \Delta_k(v_k^2 - u_k^2) = 0,\ k > 0 \tag{2.20}$$

qui, avec la condition $u_k^2 + v_k^2 = 1$, est équivalent à l'équation matricielle :

$$\begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_k & \Delta_k \\ \Delta_k & -\tilde{\epsilon}_k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \tag{2.21}$$

avec :

$$\tilde{\epsilon}_k = \frac{1}{2}\left(t_{k,k} + t_{\bar{k},\bar{k}} + \sum_{k'}(\bar{v}_{kk',kk'} + \bar{v}_{\bar{k}k',\bar{k}k'})v_{k'}^2\right) - \mu. \tag{2.22}$$

On introduit le champ d'appariement (on dit aussi "le gap"), qui jouera le rôle d'un paramètre d'ordre :

$$\Delta_k = -\sum_{k'} \bar{v}_{k\bar{k},k'\bar{k}'} u_{k'} v_{k'} \tag{2.23}$$

et les énergies des quasi-particules :

$$E_k = \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}. \tag{2.24}$$

Pour fixer les valeurs $\tilde{\epsilon}_k$ et Δ_k, (2.2) et (2.20) nous conduisent à deux équations quadratiques pour v_k^2 et u_k^2, respectivement, ayant pour solutions :

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}}\right), \\ v_k^2 &= \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}}\right). \end{aligned} \tag{2.25}$$

Sachant que, à la limite Hartree-Fock, on a $\Delta_k = 0$ et $u_k^2 = \theta(\tilde{\epsilon}_k)$, $v_k^2 = \theta(-\tilde{\epsilon}_k)$ pour $\tilde{\epsilon}_k < 0$, on en déduit :

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}}\right), \\ v_k^2 &= \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}}\right). \end{aligned} \tag{2.26}$$

Ainsi, en appliquant le principe variationnel (2.18) nous avons obtenu l'ensemble des équations couplées (2.22), (2.23) et (2.26). De plus, en tenant compte de la condition $N = \langle \hat{N} \rangle$, ces équations nous permettent de calculer les paramètres u_k et v_k de la transformation de Bogoliubov. En

général, ces équations sont non linéaires et il est souvent utile de les transformer, en insérant (2.26) dans (2.23) ; nous obtenons ainsi une équation dite "du gap" :

$$\Delta_k = -\frac{1}{2}\sum_{k'>0} \bar{v}_{k\bar{k}k'\bar{k}'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}} \tag{2.27}$$

Les équations (2.20), (2.22), (2.26) et (2.27) nous indiquent que l'état $|\mathrm{BCS}\rangle$ ne dépend que des seuls paramètres Δ_k. Il aurait donc suffi de minimiser :

$$E' = \langle \mathrm{BCS}(\Delta_k)|H - \mu\hat{N}|\mathrm{BCS}(\Delta_k)\rangle \tag{2.28}$$

par rapport aux Δ_k où le potentiel chimique est fixé par la condition :

$$\langle \mathrm{BCS}|\hat{N}|\mathrm{BCS}\rangle = N. \tag{2.29}$$

Le minimum de $E'(\Delta_k)$ détermine la solution $\Delta_k = \Delta_k^0$. La fonction $E'(\Delta_k)$ peut avoir deux comportements différents selon que la valeur de la force de couplage $g_{k,k'} = \bar{v}_{k\bar{k},k'\bar{k}'}$ est en dessous ou au dessus d'une certaine valeur critique. Pour $g_{k,k'} < g_{k,k'}^c$, nous avons :

$$\begin{array}{l} \Delta_k = 0;\ v_k^2 = 1,\ u_k^2 = 0, \quad \text{pour } \tilde{\epsilon}_k < 0 \\ \prod_k \alpha_k|-\rangle \Longrightarrow \prod_i a_i^\dagger|-\rangle \end{array} \tag{2.30}$$

ce qui veut dire que la solution avec la symétrie conservée minimise l'énergie. Dans le cas $g_{k,k'} > g_{k,k'}^c$, la solution $\Delta_k = 0$ n'est pas stable et un nouveau minimum à $\Delta_k \neq 0$ se développe : c'est la solution avec symétrie spontanément brisée.

2.3 Considérations dynamiques

Quand le paquet d'onde, qui brise la symétrie, ne se trouve pas à l'équilibre, il devient dépendant du temps et toute une dynamique apparaît. Une bonne théorie de la dynamique doit avoir comme réponse une description correcte du mouvement collectif qui correspond à l'opérateur de symétrie. Dans le cas où les surfaces d'énergie, comme celle tracées sur la figure (2.1) (qui peut être prise comme représentative de tous les cas de figure de brisure spontanée de symétrie), montrent un minimum fortement creusé, l'approximation quadratique pour des mouvements de faible amplitude est valable. En fait, pour la description dynamique, la figure (2.1) n'est pas complète. Généralement, le paramètre d'ordre peut être complexe :

$$\Delta = |\Delta|e^{i\phi}. \tag{2.31}$$

Seulement, on constate que l'énergie E' (2.28) ne dépend que de $|\Delta|^2$ même pour une transformation de Bogoliubov où les paramètres u et v sont complexes. C'est pour cela que d'habitude, nous posons $\phi = 0$ et le degré de liberté qui est représenté par la phase n'entre plus en jeu. Par contre, pour les considérations de dynamique, cette omission n'est plus possible et il est important de considérer toute la surface $E'(|\Delta|, \phi)$. En fait, puisque E' ne dépend pas de ϕ, il suffit alors de faire pivoter la figure (2.1) autour de l'axe E' pour créer la surface bidimensionnelle appelée Chapeau mexicain (voir figure (2.2)). De plus, une analyse harmonique autour du minimum donne les valeurs propres :

$$\omega_1 = \left[\frac{\partial^2 E'}{\partial|\Delta|^2}\right]_{\Delta=\Delta_0},\ \omega_2 = \left[\frac{\partial^2 E'}{\partial\phi^2}\right]_{\Delta=\Delta_0}. \tag{2.32}$$

Nous savons que ω_2 est nulle, parce qu'il n'y a pas de force de rappel dans la direction qui correspond à un déplacement collectif du paquet d'ondes. Cette excitation particulière est appelée mode de Goldstone. Finalement, il reste à rappeler que la notion de brisure spontanée de symétrie est étroitement liée aux systèmes infinis. Dans les systèmes finis il n'y a pas de vraie brisure spontanée de symétrie, c'est pour cela qu'on cherche à restaurer chaque symétrie qui est un peu artificiellement brisée dans la fonction d'onde $|\mathrm{HF}\rangle$ ou $|\mathrm{BCS}\rangle$. Nous allons voir cela plus en détail dans le chapitre intitulé "brisure et restauration de symétrie".

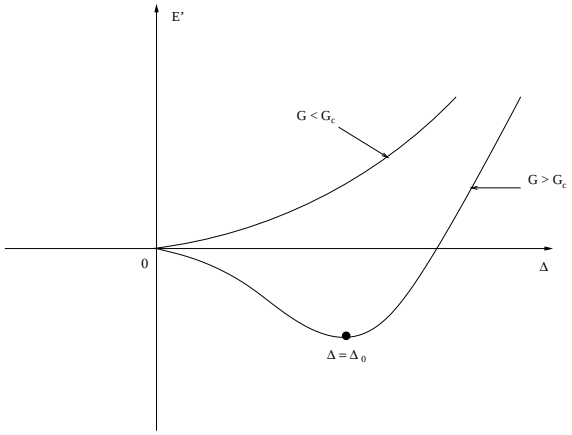

FIG. 2.1 – Comportement qualitatif de $E'(\Delta)$ pour G au dessus et en dessous de la valeur critique G_c.

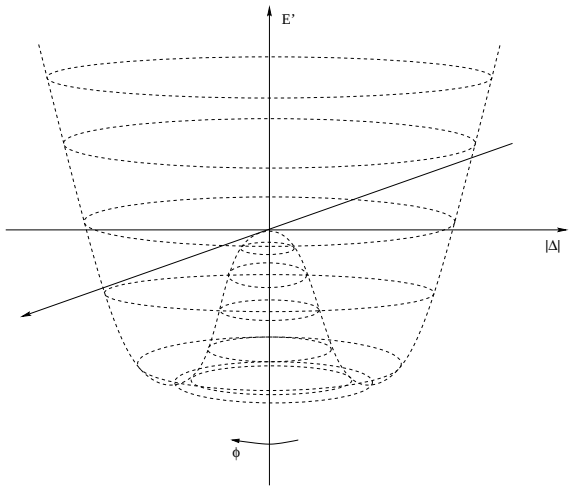

FIG. 2.2 – Surface bidimensionnelle pour un système avec symétrie continuement brisée.

2.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons formulé une théorie dans laquelle nous pouvons étudier les corrélations d'appariement. Nous avons suivie la même stratégie que celle de la méthode HF. Dans la méthode BCS nous avons manipulé des nouveaux fermions appelés quasi-particules. On a aussi évoqué la notion de la brisure spontanée de symétrie, que nous allons discuter plus en détail dans les chapitres qui suivent.

Chapitre 3

Approximation des phases aléatoires

La méthode RPA (BP53; KB62; Lan64; Row70; RS80; BR86) est la théorie la plus simple des états excités du noyau qui admet la possibilité que l'état fondamental ne doit pas un déterminant de Slater, et puisse donc contenir des corrélations. Ces corrélations, comme cela est bien connu (Row70; RS80), sont responsables de l'amélioration considérable dans certains taux de transition électromagnétiques, dans la détermination des énergies d'excitation et aussi dans le calcul de l'énergie fondamentale. En donnant une description microscopique des propriétés nucléaires, on a jusqu'ici utilisé seulement des modèles statiques de particules. On a vu que, par une définition appropriée des particules ou des quasi-particules, nous sommes capables dans tel cas d'expliquer les propriétés de base des états fondamentaux des noyaux. Les spectres d'excitation nucléaire sont aussi très importants pour une compréhension de la structure nucléaire. Si on fait l'analyse d'un tel spectre dans le cadre du modèle en couche ou dans le cadre des modèles plus élaborés des particules indépendantes tels que Hartree-Fock ou Hartree-Fock-Bogoliubov (BCS), on trouve que des séries d'états excités peuvent être adéquatement expliqués par de tels modèles comme des excitations à une ou à deux quasi-particules (RS80). Il y a cependant beaucoup d'états excités non reproductibles dans le cadre des excitations de modèle en couche, bien que l'introduction de méthodes sophistiquées entraînant la brisure de symétries nous permette de tenir compte des corrélations entre les nucléons. Dans ce chapitre, on va s'intéresser aux corrélations $(p-h)$ nécéssaires, par exemple, pour l'étude des noyaux à couche fermée (cas des noyaux doublement magiques), au-delà de la méthode HF. Les corrélations les plus simples de type $(p-h)$ sont les corrélations $(1p-1h)$ ce qui revient à briser le coeur HF en déplaçant un nucléon en dessous du niveau de fermi an dessus de ce niveau. Par conséquent, cela permet la prise en compte de corrélations dans l'état fondamental, mais aussi dans les états excités. Nous allons, d'abord, présenter cette méthode pour l'étude des corrélations $(p-h)$ et, ensuite, nous évoquerons le cas des corrélations de type $(p-p)$ ou bien $(h-h)$.

3.1 Position du problème

Considérons un système de N particules (nucléons) en interaction. Le Hamiltonien de ce système en seconde quantification est donné par :

$$H = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c^{\dagger}_{l_1} c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} c^{\dagger}_{l_1} c^{\dagger}_{l_2} c_{l_4} c_{l_3}, \tag{3.1}$$

où $\bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4}$ est le potentiel à un corps anti-symétrique :

$$\bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} = v_{l_1 l_2 l_3 l_4} - v_{l_1 l_2 l_4 l_3}. \tag{3.2}$$

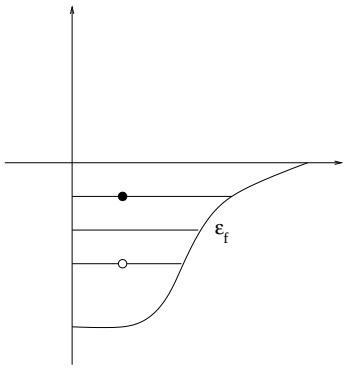

FIG. 3.1 – Excitation $p-h$ dans la méthode HF.

Par suite, pour étudier la dynamique du système on doit résoudre l'équation de Schrödinger suivante :

$$H|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle,\ \forall\nu \tag{3.3}$$

où $|0\rangle$ représente l'état fondamental et $|\nu\rangle$ (pour $\nu \neq 0$) les états excités du système. Comme nous l'avons vu dans les chapitres précédents, la méthode de Hartree-Fock (HF) nous permet de trouver une solution approchée de l'équation (3.3) dans l'espace à une particule. Cette solution qui diagonalise le Hamiltonien H d'une manière approchée peut servir de base notée "base HF", dans laquelle on peut développer les fonctions d'onde de l'état fondamental exact à N particules $|0\rangle$, ainsi que celles des états excités $|\nu\rangle$. La solution exacte de l'équation de Schrödinger doit être alors obtenue soit par diagonalisation de H dans la base HF, soit par une variation des coefficients du développement suivant :

$$|0\rangle = C_0^0|\mathrm{HF}\rangle + \sum_{mi} C_{mi}^0 a_m^\dagger a_i|\mathrm{HF}\rangle + \frac{1}{4}\sum_{mnij} C_{mn,ij}^0 a_m^\dagger a_n^\dagger a_i a_j|\mathrm{HF}\rangle + \ldots \tag{3.4a}$$

$$|\nu\rangle = C_0^\nu|\mathrm{HF}\rangle + \sum_{mi} C_{mi}^\nu a_m^\dagger a_i|\mathrm{HF}\rangle + \frac{1}{4}\sum_{mnij} C_{mn,ij}^\nu a_m^\dagger a_n^\dagger a_i a_j|\mathrm{HF}\rangle + \ldots \tag{3.4b}$$

Le déterminant $|\mathrm{HF}\rangle$ comme nous l'avons vu, est obtenu en remplissant les N niveaux à une particule les plus bas du potentiel de Hartree-Fock. Les niveaux occupés sont désignés par les indices i,j (états de trous : $1 \leqslant i,j \leqslant N$), les niveaux vides par m,n (états de particules : $m,n > N$) et les niveaux arbitraires par d'autres indices. Ainsi, l'opérateur $a_m^\dagger a_i$ annihile une particule (crée un trou) en dessous du niveau de Fermi ϵ_f et crée une particule au dessus de ϵ_f (voir Fig.3.1). Il est donc appelé opérateur de création particule-trou $(p-h)$.

La diagonalisation exacte de H dans l'espace à une particule complet (ou du modèle en couche) constitue une tâche très difficile, voire même impossible. C'est pour cela qu'on a recours à des approximations. La dérivation et les discussions de ces approximations fera l'objet de ce chapitre.

3.2 Equations RPA dans le cas des corrélations *ph*

Pour établir les équations RPA, nous utilisons la méthode des équations de mouvement de Rowe (Row68; Row70). On commence par considérer un ensemble d'états propres exacts du Hamiltonien :

$$H|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle. \tag{3.5}$$

Il est possible de définir des opérateurs $Q_\nu^\dagger$ et Q_ν tels que :

$$|\nu\rangle = Q_\nu^\dagger|0\rangle \qquad \text{et} \qquad Q_\nu|0\rangle = 0. \tag{3.6}$$

Donc, l'opérateur d'excitation $Q_\nu^\dagger$ peut s'écrire comme suit :

$$Q_\nu^\dagger = |\nu\rangle\langle 0|. \tag{3.7}$$

En utilisant l'équation de Schrödinger (3.5), on obtient l'équation du mouvement suivante :

$$[H, Q_\nu^\dagger]|0\rangle = (E_\nu - E_0)Q_\nu^\dagger|0\rangle. \tag{3.8}$$

En multipliant à gauche par un état arbitraire de la forme $\langle 0|\delta Q$, on obtient :

$$\langle 0|\delta Q[H, Q_\nu^\dagger]|0\rangle = (E_\nu - E_0)\langle 0|\delta Q Q_\nu^\dagger|0\rangle. \tag{3.9}$$

Or, puisque $\langle 0|Q_\nu^\dagger = \langle 0|HQ_\nu^\dagger = 0$, on peut utiliser le commutateur pour écrire :

$$\langle 0|[\delta Q, [H, Q_\nu^\dagger]]|0\rangle = (E_\nu - E_0)\langle 0|[\delta Q, Q_\nu^\dagger]|0\rangle. \tag{3.10}$$

Tant que la variation $\langle 0|\delta Q$ s'étend dans tout l'espace de Hilbert, l'équation (3.10) est exacte et elle est équivalente à l'équation de Schrödinger (3.5). Cependant, comme nous l'avons signalé au début de ce chapitre, la résolution de cette équation d'une façon exacte est impossible. C'est pour cette raison que nous avons recours à des approximations. Comme première approximation, on suppose qu'on peut se limiter à l'espace des excitations $(1p-1h)$. Par conséquent, dans les développements (3.4*a*) et (3.4*b*) on ne garde que les termes du premier ordre. On parle de la méthode de Tamm-Dancoff (RS80). L'état fondamental ainsi que les états excités sont respectivement donnés par :

$$|0\rangle \simeq C_0^0|\mathrm{HF}\rangle + \sum_{mi} C_{mi}^0 a_m^\dagger a_i|\mathrm{HF}\rangle \tag{3.11a}$$

$$|\nu\rangle \simeq C_0^\nu|\mathrm{HF}\rangle + \sum_{mi} C_{mi}^\nu a_m^\dagger a_i|\mathrm{HF}\rangle. \tag{3.11b}$$

Puisque $\langle \mathrm{HF}|Ha_m^\dagger a_i|\mathrm{HF}\rangle = 0$ on remarque que l'état fondamental n'est autre que l'état HF, ce qui veut dire que dans cette approximation on a négligé les corrélations dans l'état fondamental. Par contre, pour les états excités il suffit de garder $|\nu\rangle \simeq Q_\nu^\dagger|\mathrm{HF}\rangle$, ce qui permet de conserver les corrélations $(1p-1h)$. Donc, dans la méthode de Tamm-Dancoff l'opérateur d'excitation $Q_\nu^\dagger$ est approximé par l'opérateur de création $(1p-1h)$ suivant :

$$Q_\nu^\dagger = \sum_{mi} C_{mi}^\nu a_m^\dagger a_i. \tag{3.12}$$

Malgré la simplicité de l'idée de cette approximation, il s'est avéré qu'elle constitue une bonne approximation pour certain états, plus précisement les états de basse énergie. *A priori*, cela peut être justifiable puisque le sous-ensemble des excitations $(1p-1h)$ sont les configurations de basse énergie dans la méthode HF et devraient donc être importantes pour les états les plus bas du spectre d'excitation. Cependant, le fait que l'on néglige les corrélations dans l'état fondamental constitue une approximation sévère. Pour remédier à ce défaut, on peut généraliser l'opérateur (3.12) pour obtenir un état fondamental plus général contenant des corrélations de type $(2p-2h)$. Naturellement, si on crée une paire $p-h$ rien n'empêche d'en détruire une autre simultanément. Donc, la généralisation directe de cette approximation revient à tenir compte, dans l'opérateur de création, d'une paire $(1p-1h)$ et de la destruction simultanée d'une autre paire $(1p-1h)$. On parle alors de la méthode RPA. Dans cette approximation, l'opérateur d'excitation $(p-h)$ qui va être appelé dorénavant "opérateur d'excitation RPA", s'écrit comme suit :

$$Q_\nu^\dagger = \sum_{mi} X_{mi}^\nu a_m^\dagger a_i - \sum_{mi} Y_{mi}^\nu a_i^\dagger a_m \tag{3.13}$$

où le signe moins est choisi par convention. On remarque que, à la place d'une seule matrice C_{mi}^ν, nous avons maintenant deux matrices X_{mi}^ν et Y_{mi}^ν qui seront appelés les amplitudes RPA. L'état fondamental RPA est définit par analogie avec (3.6) par :

$$Q_\nu|\mathrm{RPA}\rangle = 0. \tag{3.14}$$

Bien que cette dernière relation constitue une définition exacte de l'état fondamental RPA, elle ne permet sa construction explicite que dans certain cas simple. Comme on a maintenant deux types de variations $\delta Q^\dagger|0\rangle$, à savoir $a_m^\dagger a_i|0\rangle$ et $a_i^\dagger a_m|0\rangle$, alors à partir de l'équation (3.10) on obtient deux ensembles d'équations :

$$\langle \mathrm{RPA}|[a_i^\dagger a_m,[H,Q_\nu^\dagger]]|\mathrm{RPA}\rangle = \Omega_\nu \langle \mathrm{RPA}|[a_i^\dagger a_m, Q_\nu^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle, \tag{3.15a}$$
$$\langle \mathrm{RPA}|[a_m^\dagger a_i,[H,Q_\nu^\dagger]]|\mathrm{RPA}\rangle = \Omega_\nu \langle \mathrm{RPA}|[a_m^\dagger a_i, Q_\nu^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle, \tag{3.15b}$$

où Ω_ν représente l'énergie d'excitation de l'état $|\nu\rangle$ ($\Omega_\nu = E_\nu - E_0$). Ces équations contiennent des valeurs moyennes de quatre opérateurs de fermions sur l'état fondamental RPA qui ne sont pas calculables, puisque l'état fondamental RPA est encore inconnu. Pour surmonter ce problème on utilise une approximation qui consiste à supposer que l'état fondamental RPA peut être approximé par un déterminant de Slater $|\mathrm{HF}\rangle$. Explicitement, cela se traduit par le fait qu'on suppose que les opérateurs de création et de destruction de paire $(p-h)$, qui sont de caractère fermionique, obéissent à des règles de commutation d'opérateurs bosoniques, d'où le nom "RPA quasi-boson". Par exemple, on a :

$$\langle \mathrm{RPA}|[a_i^\dagger a_m, a_n^\dagger a_j]|\mathrm{RPA}\rangle \simeq \langle \mathrm{HF}|[a_i^\dagger a_m, a_n^\dagger a_j]|\mathrm{HF}\rangle = \delta_{ij}\delta_{mn}. \tag{3.16}$$

Dans l'approximation quasi-boson (BET61), les amplitudes RPA X_{mi}^ν et Y_{mi}^ν ont une interprétation physique directe puisque leurs modules au carré représentent les probabilités de trouver les états $a_m^\dagger a_i|0\rangle$ et $a_i^\dagger a_m|0\rangle$ dans l'état excité $|\nu\rangle$ ce sont les élements ph et hp de la matrice densité de transition $\rho^{(1)}$:

$$\begin{aligned} \rho_{mi}^{(1)^\nu} &= \langle 0|a_i^\dagger a_m|\nu\rangle \simeq \langle \mathrm{HF}|[a_i^\dagger a_m, Q_\nu^\dagger]|\mathrm{HF}\rangle = X_{mi}^\nu, \\ \rho_{im}^{(1)^\nu} &= \langle 0|a_m^\dagger a_i|\nu\rangle \simeq \langle \mathrm{HF}|[a_m^\dagger a_i, Q_\nu^\dagger]|\mathrm{HF}\rangle = Y_{mi}^\nu \end{aligned} \tag{3.17}$$

En exprimant le Hamiltonien H de l'équation (3.1) dans la base HF, dans l'approximation RPA quasi-boson, les équations (3.15) peuvent s'écrire sous une forme compacte :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} = \Omega_\nu \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} \tag{3.18}$$

avec les matrices amplitudes $(X^\nu)_{mi} = X_{mi}^\nu$, $(Y^\nu)_{mi} = Y_{mi}^\nu$ et les matrices RPA :

$$\begin{aligned} A_{mi,nj} &= \langle \mathrm{HF}|[a_i^\dagger a_m,[H,a_n^\dagger a_j]]|\mathrm{HF}\rangle = (\epsilon_m - \epsilon_i)\delta_{mn}\delta_{ij} + \bar{v}_{mj,in} \\ B_{mi,nj} &= -\langle \mathrm{HF}|[a_i^\dagger a_m,[H,a_j^\dagger a_n]]|\mathrm{HF}\rangle = \bar{v}_{mn,ij}. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Les ϵ_k dans l'expression de $A_{mi,nj}$ sont les énergies à une particule de la méthode HF qui peuvent être exprimées par :

$$\langle \{a_k,[H,a_{k'}^\dagger]\}\rangle = \delta_{kk'}\epsilon_k. \tag{3.20}$$

Les équation (3.18) et (3.19) s'appellent les équations RPA standard. On doit signaler que la matrice A est hermitique alors que B est une matrice symétrique. Par conséquent, le problème (3.18) n'est pas hermitique et on peut se retrouver avec des valeurs propres Ω_ν qui ne sont pas réelles. Finalement, on doit remarquer que les amplitudes RPA Y_{mi}^ν sont celles qui mesurent les corrélations dans l'état fondamental.

3.2.1 Energie du fondamental dans la méthode RPA

Pour la dérivation des équations RPA, nous avons utilisé l'approximation quasi-boson qui consiste à remplacer les opérateurs paires de fermions de type $a_m^\dagger a_i$ par des opérateurs de bosons $b_{mi}^\dagger$:

$$a_m^\dagger a_i \to b_{mi}^\dagger\,, \qquad a_i^\dagger a_m \to b_{mi}. \tag{3.21}$$

Ils obéissent aux règles de commutation exactes des bosons :

$$[b_{mi}, b_{m'i'}] = [b^\dagger_{mi}, b^\dagger_{m'i'}] = 0; \quad [b_{mi}, b^\dagger_{m'i'}] = \delta_{mm'}\delta_{ii'}. \tag{3.22}$$

Cette substitution est une approximation. En effet, les opérateurs de paires de fermions peuvent être exprimés en série d'opérateurs de bosons, dans lesquels le premier terme est $b^\dagger_{mi}$ (méthode du développement bosonique (RS80)). Par conséquent, dans l'approximation quasi-boson nous négligeons tous les termes d'ordre supérieur. Ainsi quand nous exécutons les relations de commutation, nous violons le parincipe de Pauli en négligeant les autres termes du développement bosonique. Une telle approximation revient à supposer que les corrélations $(p-h)$ n'influencent pas assez le fondamental pour s'éloigner de l'approximation HF. Ainsi pour certaines valeurs moyennes, on suppose que $|\mathrm{RPA}\rangle = |\mathrm{HF}\rangle$. Ce qui rend la raison d'être de l'amplitude RPA Y^ν_{mi} caduque, son rôle étant, justement, de représenter les corrélations $(2p-2h)$. De plus, cela constitue une incohérence dans la méthode RPA standard et engendre une violation du principe variationnel.

En outre, puisqu'on utilise l'approximation quasi-boson dans la méthode RPA, il est intéressant de représenter d'autres opérateurs comme le Hamiltonien ou l'opérateur nombre de particules (ou de quasi-particules) grâce aux b et $b^\dagger$. En effectuant un développement bosonique du Hamiltonien jusqu'au second ordre en b, (c'est à dire bb, $b^\dagger b^\dagger$ et $b^\dagger b$) ce qui est cohérent avec l'approximation quasi-boson (c'est aussi l'ordre nécessaire pour la dérivation des équations RPA), on peut établir ces équations. En utilisant les deux conditions suivantes :

$$\langle \mathrm{HF}|[b_{mi}, [H, b^\dagger_{nj}]]|\mathrm{HF}\rangle = \langle \mathrm{HF}|[a^\dagger_i a_m, [H, a^\dagger_n a_j]]|\mathrm{HF}\rangle = A_{mi,nj}, \tag{3.23}$$

$$\langle \mathrm{HF}|[b_{mi}, [H, b_{nj}]]|\mathrm{HF}\rangle = \langle \mathrm{HF}|[a^\dagger_i a_m, [H, a^\dagger_j a_n]]|\mathrm{HF}\rangle = -B_{mi,nj}, \tag{3.24}$$

on trouve les coefficients des termes quadratiques dans le développement du Hamiltonien qui peut être alors donné par :

$$\begin{aligned} H \to H_b &= E_{HF} + \sum_{minj} A_{mi,nj} b^\dagger_{mi} b_{nj} + \frac{1}{2}\sum_{minj}(B_{mi,nj} b^\dagger_{mi} b^\dagger_{nj} + h.c.) \\ &= E_{HF} - \frac{1}{2}\sum_{mi} A_{mi,mi} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} b^\dagger & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b & b^\dagger \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{3.25}$$

où la constante E_{HF} correspond à la valeur moyenne du Hamiltonien dans l'état fondamental $|\mathrm{HF}\rangle$. De plus, en introduisant une transformation de Bogoliubov pour les opérateurs bosoniques correspondant à (3.13) et en remplaçant l'opérateur d'excitation RPA Q_ν par un opérateur de boson pur O_ν :

$$O^\dagger_\nu = \sum_{mi} X^\nu_{mi} b^\dagger_{mi} - \sum_{mi} Y^\nu_{mi} b_{mi}, \tag{3.26}$$

la diagonalisation du Hamiltonien (3.25) devient facile. Enfin, en exprimant le Hamiltonien avec les opérateurs O_ν et en utilisant l'inverse de l'équation RPA on obtient :

$$H_b = E_{RPA} + \sum_{\nu \geqslant 0} \Omega_\nu O^\dagger_\nu O_\nu \tag{3.27}$$

où,

$$\begin{aligned} E_{RPA} &= E_{HF} - \frac{1}{2}Tr(A) + \frac{1}{2}\sum_\nu \Omega_\nu \\ &= E_{HF} - \sum_\nu \Omega_\nu \sum_{mi} |Y^\nu_{mi}|^2. \end{aligned} \tag{3.28}$$

Le Hamiltonien (3.27) est une somme de Hamiltonien de type oscillateur harmonique. C'est la raison pour laquelle la RPA standard est appelée "approximation harmonique". Ainsi, les fonctions

propres de H_b sont l'état fondamental RPA (qui est dans ce cas le vide des opérateurs O_ν), les états à un boson $O_\nu^\dagger|\text{RPA}\rangle$, à deux bosons $O_\nu^\dagger O_{\nu'}^\dagger|\text{RPA}\rangle$, etc. En regardant l'équation (3.28), on comprend clairement le rôle des amplitudes Y_{mi}^ν. On remarque que ce genre d'amplitude permet de mesurer les corrélations dans l'état fondamental RPA. Par suite, l'équation (3.28) montre que l'énergie fondamental E_{RPA} est toujours plus petite que l'énergie HF. La différence donne l'énergie de corrélation dans le fondamental (RS80) au-delà de HF :

$$E_c = \frac{1}{2}\left(\sum_\nu \Omega_\nu - Tr(A)\right) \tag{3.29}$$

$$= -\sum_\nu \Omega_\nu \sum_{mi} |Y_{mi}^\nu|^2. \tag{3.30}$$

Il est bien connu (HB00b; HB00a) que la formule (3.29) donne de bons résultats pour l'énergie de corrélations loin des zones où il se produit des transition de phase. Cependant, cela ne veut pas dire que que nous aurons une bonne approximation. En effet, nous avons déja vu que la méthode RPA standard n'est pas variationnelle et peut alors donner une énergie au dessous de l'énergie exacte [1]. Quand l'énergie fondamentale de la RPA standard est très proche de l'énergie exacte il s'agit probablement d'un "accident".

3.2.2 Construction de l'état fondamental RPA

Initialement dans la méthode RPA le vide était défini comme étant celui des opérateurs Q_ν. Dans l'approximation quasi-boson il est maintenant équivalent au vide $|\text{RPA}\rangle$ des opérateurs des bosons O_ν :

$$O_\nu|\text{RPA}\rangle = 0. \tag{3.31}$$

D'après le théorème de Thouless (Tho60), on peut construire ce vide explicitement à partir du vide $|\text{HF}\rangle$ des bosons b_{mi} comme suit :

$$|\text{RPA}\rangle = N_0 e^{\hat{Z}}|\text{HF}\rangle \tag{3.32}$$

où

$$\hat{Z} = \frac{1}{2}\sum_{minj} Z_{minj} b_{mi}^\dagger b_{nj}^\dagger \tag{3.33}$$

et N_0 est une normalisation. Pour la matrice Z en utilisant (3.22) et (3.26) on obtient :

$$Z = Y^* X^{*-1} \tag{3.34}$$

où X^* et Y^* sont les matrices des amplitudes RPA conjugués. L'inversion de la matrice X est, en principe, toujours possible. Cela permet la construction de l'état fondamental RPA. Par conséquent, on peut éviter l'approximation quasi-boson.

3.2.3 Relations d'orthonormalisation et de fermeture

Puisque la matrice RPA :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \tag{3.35}$$

est en général non hermitique, ses vecteurs propres ne peuvent pas être orthogonaux dans le sens usuel. Par conséquent, nous devons définir des nouvelles relations d'orthogonalité. Pour cela, en utilisant la condition que les états excités :

$$|\nu\rangle = Q_\nu^\dagger|\text{RPA}\rangle \tag{3.36}$$

[1] Nous entendons par "énergie exacte", l'énergie calculée pour un modèle exactement soluble ou bien la valeur expérimentale de l'énergie.

doivent être orthonormalisés, c'est-à-dire :

$$\langle\nu|\nu'\rangle = \delta_{\nu\nu'} = \langle \mathrm{RPA}|[Q_\nu, Q^\dagger_{\nu'}]|\mathrm{RPA}\rangle \simeq \langle \mathrm{HF}|[Q_\nu, Q^\dagger_{\nu'}]|\mathrm{HF}\rangle, \tag{3.37}$$

nous obtenons les relations d'orthogonalité suivantes :

$$\delta_{\nu\nu'} = \sum_{mi}\left(X^{\nu^*}_{mi}X^{\nu'}_{mi} - Y^{\nu^*}_{mi}Y^{\nu'}_{mi}\right). \tag{3.38}$$

En fait, nous pouvons montrer que les solutions des équations RPA pour $\nu \neq \nu'$ vérifient cette relation exactement. Pour $\nu = \nu'$ cela nous donne la possibilité de normaliser les états, si la norme est positive. Cependant, pour montrer l'orthogonalité des solutions RPA dans le sens (3.38) on doit d'abord noter que pour chaque vecteur propre (X^ν, Y^ν) de valeur propre Ω_ν il correspond un autre vecteur propre (Y^{ν^*}, X^{ν^*}) de valeur propre $-\Omega_\nu$. Les deux vecteurs propres ont la même norme absolue dans le sens de (3.38) mais avec des signes opposées. En considérant les matrices suivantes :

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix};\ \mathcal{X} = \begin{pmatrix} X^\nu & Y^{\nu^*} \\ Y^\nu & X^{\nu^*} \end{pmatrix};\ \mathcal{N} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};\ \Omega = \begin{pmatrix} \Omega_\nu & 0 \\ 0 & -\Omega_\nu \end{pmatrix} \tag{3.39}$$

on peut écrire l'équation RPA (3.18) sous la forme suivante :

$$\mathcal{S}\mathcal{X} = \mathcal{N}\mathcal{X}\Omega. \tag{3.40}$$

De plus, on peut montrer que Ω commute avec $\mathcal{X}^\dagger\mathcal{N}\mathcal{X}$:

$$\begin{aligned} [\Omega, \mathcal{X}^\dagger\mathcal{N}\mathcal{X}] &= \Omega\mathcal{X}^\dagger\mathcal{N}\mathcal{X} - \mathcal{X}^\dagger\mathcal{N}\mathcal{X}\Omega \\ &= (\mathcal{N}\mathcal{X}\Omega)^\dagger\mathcal{X} - \mathcal{X}^\dagger(\mathcal{N}\mathcal{X}\Omega) \\ &= \mathcal{X}^\dagger(\mathcal{S}^\dagger - \mathcal{S})\mathcal{X} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3.41}$$

ce qui prouve que la matrice $\mathcal{X}^\dagger\mathcal{N}\mathcal{X}$ est diagonale. Puisque la norme des vecteurs (X, Y) n'est pas fixée, on peut choisir :

$$\mathcal{X}^\dagger\mathcal{N}\mathcal{X} = \mathcal{N}. \tag{3.42}$$

Ces conditions sont identiques aux conditions d'orthogonalités (3.38). En multipliant (3.42) par $\mathcal{N}$, on peut montrer que $\mathcal{N}\mathcal{X}\mathcal{N}$ est l'inverse de $\mathcal{X}^\dagger$, ainsi les relations de fermeture sont données par :

$$\mathcal{X}\mathcal{N}\mathcal{X}^\dagger = \mathcal{N}. \tag{3.43}$$

En fonction des amplitudes RPA elles s'écrivent comme suit :

$$\sum_\nu\left(X^\nu_{mi}X^{\nu^*}_{m'i'} - Y^{\nu^*}_{mi}Y^\nu_{m'i'}\right) = \delta_{mm'}\delta_{ii'}\,. \tag{3.44}$$

Venons en à la matrice $\mathcal{S}$ utilisée dans l'équation RPA (3.18). Elle est la matrice de stabilité de la théorie HF (RS80). On l'appelle ainsi car c'est une matrice hermitique dont les valeurs propres caractérisent la nature des solutions HF : si $\mathcal{S}$ est positive alors ces solutions correspondent à un minimum d'énergie. Dans ce cas nous pouvons calculer la racine carrée de $\mathcal{S}$ et écrire le problème aux valeurs propres (3.18) dans une forme plus symétrique :

$$\mathcal{S}^{1/2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\mathcal{S}^{1/2}\begin{pmatrix} \bar{X} \\ \bar{Y} \end{pmatrix} = \Omega\begin{pmatrix} \bar{X} \\ \bar{Y} \end{pmatrix} \tag{3.45}$$

où,

$$\begin{pmatrix} \bar{X} \\ \bar{Y} \end{pmatrix} = \mathcal{S}^{1/2} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \tag{3.46}$$

qui est maintenant un problème aux valeurs propres hermitique ne possèdant que des solutions réelles. En d'autres termes, si la solution HF correspond à un minimum sur la surface d'énergie et non pas à un point de selle ou à un maximum, alors les équations RPA n'ont que des fréquences réelles, sinon il peut y avoir des valeurs propres imaginaires.

3.3 Cas des corrélations pp et hh

Par analogie avec le cas des noyaux à couches fermées (doublement magique) où nous avons établi la méthode RPA $(p-h)$, on peut aussi établir une méthode RPA pour tenir compte des corrélations $(p-p)$ et $(h-h)$ dans l'état fondamental des noyaux à couches ouvertes (où partiellement remplies). Suivant la même démarche, dans le cas $(p-p)$, l'état propre $|\nu\rangle$ du système à $N+2$ particules s'écrit :

$$|N+2,\nu\rangle = \Big(\sum_{m<n} X^{\nu}_{mn} a^{\dagger}_m a^{\dagger}_n - \sum_{i<j} Y^{\nu}_{ij} a^{\dagger}_j a^{\dagger}_i\Big)|N,0\rangle \tag{3.47}$$

$$= P^{\dagger}_{\nu}|N,0\rangle \tag{3.48}$$

et dans le cas $(h-h)$ l'état propre $|\lambda\rangle$ du système à $N-2$ particles s'écrit :

$$|N-2,\lambda\rangle = \Big(\sum_{i<j} X^{\lambda}_{ij} a_i a_j - \sum_{n<m} Y^{\lambda}_{mn} a_n a_m\Big)|N,0\rangle \tag{3.49}$$

$$= R^{\dagger}_{\lambda}|N,0\rangle. \tag{3.50}$$

L'état fondamental qui appartient au système à N-particules est alors donné par :

$$P_{\nu}|N,0\rangle = R_{\lambda}|N,0\rangle = 0. \tag{3.51}$$

En utilisant l'approximation quasi-boson on obtient respectivement les amplitudes RPA pour les systèmes à $N+2$ particules et à $N-2$ particules, comme suit :

$$X^{\nu}_{mn} = \langle N,0|a_n a_m|N+2,\nu\rangle; \quad Y^{\nu}_{ij} = \langle N,0|a_i a_j|N+2,\nu\rangle \tag{3.52a}$$

$$X^{\lambda}_{ij} = \langle N,0|a^{\dagger}_j a^{\dagger}_i|N-2,\lambda\rangle; \quad Y^{\lambda}_{mn} = \langle N,0|a^{\dagger}_m a^{\dagger}_n|N-2,\lambda\rangle. \tag{3.52b}$$

Par analogie avec le cas de la ph-RPA et en utilisant l'équation de mouvement qui correspond à l'opérateur de création de paires de particules $P^{\dagger}_{\nu}$, on obtient :

$$\langle N,0|[a_n a_m,[H,P^{\dagger}_{\nu}]]|N,0\rangle = \Omega_{\nu}\langle N,0|[a_n a_m,P^{\dagger}_{\nu}]|N,0\rangle \tag{3.53}$$

$$\langle N,0|[a_i a_j,[H,P^{\dagger}_{\nu}]]|N,0\rangle = \Omega_{\lambda}\langle N,0|[a_i a_j,P^{\dagger}_{\nu}]|N,0\rangle. \tag{3.54}$$

où $\Omega_{\nu} = E^{N+2}_{\nu} - E^{N}_{0}$ et $\Omega_{\lambda} = E^{N}_{0} - E^{N-2}_{\lambda}$ sont respectivement les énergies d'excitation des systèmes à $N+2$ et $N-2$ particules. Elles sont calculées par rapport à l'état fondamental du système à N particules. Par conséquent, dans l'approximation quasi-boson (on rappelle que l'état fondamental $|N,0\rangle$ est approximé par l'état $HF\rangle$), pour le mode d'addition $P^{\dagger}_{\nu}$ on peut écrire :

$$\begin{aligned} \sum_{m'<n'} (\delta_{mm'}\delta_{nn'}(\epsilon_{m'}+\epsilon_{n'}) + \bar{v}_{mnm'n'}) X^{\nu}_{m'n'} - \sum_{i'<j'} \bar{v}_{mni'j'} Y^{\nu}_{i'j'} &= \Omega_{\nu} X^{\nu}_{mn} \\ - \sum_{m'<n'} \bar{v}_{ijm'n'} X^{\nu}_{m'n'} + \sum_{i'<j'} (-\delta_{ii'}\delta_{jj'}(\epsilon_{i'}+\epsilon_{j'}) + \bar{v}_{iji'j'}) Y^{\nu}_{i'j'} &= -\Omega_{\lambda} Y^{\nu}_{ij} \end{aligned} \tag{3.55}$$

Matriciellement le système d'équations RPA pour le mode d'addition s'écrit comme suit :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_p^\nu \\ Y_h^\nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_\nu & 0 \\ 0 & -\Omega_\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_p^\nu \\ Y_h^\nu \end{pmatrix} \tag{3.56}$$

où les éléments de la matrice RPA sont donnés par :

$$\begin{aligned} A_{mn,m'n'} &= \delta_{mm'}\delta_{nn'}(\epsilon_{m'} + \epsilon_{n'}) + \bar{v}_{mnm'n'} \\ C_{ij,i'j'} &= -\delta_{ii'}\delta_{jj'}(\epsilon_{i'} + \epsilon_{j'}) + \bar{v}_{iji'j'} \\ B_{mnij} &= -\bar{v}_{mnij} \end{aligned} \tag{3.57}$$

De la même manière pour l'opérateur de création de paires de trous $R_\lambda^\dagger$, on peut écrire :

$$\langle N,0|[a_j^\dagger a_i^\dagger,[H,R_\lambda^\dagger]]|N,0\rangle = \Omega_\nu \langle N,0|[a_j^\dagger a_i^\dagger,R_\lambda^\dagger]|N,0\rangle \tag{3.58}$$

$$\langle N,0|[a_m^\dagger a_n^\dagger,[H,R_\lambda^\dagger]]|N,0\rangle = \Omega_\lambda \langle N,0|[a_m^\dagger a_n^\dagger,R_\lambda^\dagger]|N,0\rangle \tag{3.59}$$

où $\Omega_\nu = E_\nu^{N+2} - E_0^N$ et $\Omega_\lambda = E_0^N - E_\lambda^{N-2}$ sont respectivement les énergies d'excitation des systèmes à $N+2$ et $N-2$ particules. Elles sont calculées par rapport à l'état fondamental du système à N particules. Par suite, on peut aussi écrire explicitement :

$$\begin{aligned} \sum_{i'<j'}(-\delta_{ii'}\delta_{jj'}(\epsilon_{i'}+\epsilon_{j'}) + \bar{v}_{iji'j'})X_{i'j'}^\lambda - \sum_{n'<m'} \bar{v}_{ijn'm'}Y_{n'm'}^\lambda &= -\Omega_\nu X_{ij}^\lambda \\ -\sum_{i'<j'} \bar{v}_{nmi'j'}X_{i'j'}^\lambda + \sum_{n'<m'}(\delta_{mm'}\delta_{nn'}(\epsilon_{n'}+\epsilon_{m'}) + \bar{v}_{nmn'm'})Y_{n'm'}^\lambda &= \Omega_\lambda Y_{nm}^\lambda \end{aligned} \tag{3.60}$$

Matriciellement ceci se réecrit comme :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_p^\lambda \\ X_h^\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_\lambda & 0 \\ 0 & -\Omega_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_p^\lambda \\ X_h^\lambda \end{pmatrix} \tag{3.61}$$

où les matrices A, B et C sont exactement les mêmes matrices que celles obtenues pour le mode d'addition. Pour faire un calcul pp-RPA, il suffit d'établir les équations RPA seulement pour un des deux modes d'addition ou de retrait. Par conséquent, à l'aide de (3.56) ou de (3.61) on obtient simultanément les états propres des systèmes à $N \pm 2$, qui sont différents de ceux obtenus dans le cas de la ph-RPA dans laquelle on a seulement les solutions pour le même nombre de particules. En général, les matrices A et C sont hermitiques, alors que B est une matrice symétrique.

Finalement, par analogie avec la ph-RPA, on obtient les relations d'orthonormalisations qui peuvent s'écrire comme suit :

$$\sum_{m<n} X_{mn}^{\nu^*}X_{mn}^{\nu'} - \sum_{i<j} Y_{ij}^{\nu^*}Y_{ij}^{\nu'} = \delta_{\nu,\nu'} \tag{3.62a}$$

$$\sum_{i<j} X_{ij}^{\lambda^*}X_{ij}^{\lambda'} - \sum_{m<n} Y_{mn}^{\lambda^*}Y_{mn}^{\lambda'} = \delta_{\lambda,\lambda'} \tag{3.62b}$$

Les relations de fermeture ($r<s,\ r'<s'$) sont :

$$\sum_\nu X_{rs}^\nu X_{r's'}^{\nu^*} - \sum_\lambda Y_{rs}^{\lambda^*}Y_{r's'}^\lambda = \delta_{rr'}\delta_{ss'}. \tag{3.63}$$

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la méthode RPA standard. Nous l'avons établi pour le traitement des corrélations (ph) et surtout des corrélations de types (pp) et (hh). Nous rappelons

que la méthode RPA standard constitue une solution de type champ moyen à deux particules des équations de la méthode EMM. Ainsi, elle constitue une méthode qui permet d'aller au-delà des méthodes de champ moyen standard (HF et BCS) (qui sont de type champ moyen à une particule). Cependant, tout ce que nous avons établi pour la méthode RPA standard repose sur une inconsistance de taille ! En effet, dans l'approximation quasi-bosons nous considérons que les corrélations dans l'état fondamental sont négligeables, alors que la dérivation des équations RPA suppose l'existence de celles-ci. Cette incohérence apparaît sous la forme d'une surestimation des corrélations dans l'énergie de l'état fondamental de la théorie (la méthode RPA standard brise le principe variationnel). Nous pouvons voir ce problème d'une autre façon. En fait, dans la méthode RPA standard, qui peut être établie à l'aide d'un développement bosonique, l'incohérence provient de la violation du principe de Pauli. Dans l'approche quasi-bosons, les différents opérateurs qui entrent en jeu ne sont pas développés au même ordre en bosons. On développe les opérateurs d'excitation (par exemple, $a_m^\dagger a_i$) à l'ordre linéaire et le Hamiltonien est développé au second ordre. Cette limitation dans l'ordre du développement engendre automatiquement une violation du principe de Pauli qui se manifeste par une surestimation des corrélations dans l'état fondamental RPA. Par conséquent, on a une violation du principe variationnel. Nous rappelons que, au départ, le système d'équations de la méthode RPA (sans quasi-bosons) était non linéaire, et le problème était de savoir comment fermer ce système. Une extension de la méthode RPA, qui peut résoudre ce problème, va être présentée dans le chapitre suivant ; elle portera le nom de approximation de la phase aléatoire self-consistante (SCRPA : Self-consistent Random Phase Approximation).

Chapitre 4

RPA Self-Consistante

4.1 Introduction

Commme nous l'avons montré dans le chapitre précédent, la méthode RPA standard présente plusieurs défauts et incohérences. En effet, à cause de l'approximation quasi-bosons, la méthode RPA standard viole le principe de Pauli, ce qui se traduit par une violation du principe variationnel. Dans le but de surmonter ces problèmes et d'obtenir une théorie totalement "self-consistante", P. Schuck et J. Dukelsky (DS90; DS91; DS96; SDR97; DS99; DHS00; HMDS02) ont établi la méthode SCRPA. En suivant les idées de Rowe dans sa dérivation d'une méthode basée sur la méthode des équations de mouvement EMM (Row68; Row70) appelée "RPA renormalisée", Schuck et Dukelsky ont trouvé une méthode pour résoudre le problème sans introduire d'approximations supplémentaires. En effet, ils ont trouvé un moyen pour calculer toutes les valeurs moyennes dans l'état fondamental nécessaire pour pouvoir mener le calcul jusqu'au bout. Par conséquent, la méthode SCRPA constitue une approximation self-consistante de type champ moyen à deux particules, c'est-à-dire pour les fluctuations quantiques. Elle permet le traitement des corrélations d'une manière self-consistante. Le problème essentiel d'une telle théorie est de savoir comment fermer le système d'équations sans pour autant le tronquer.

4.2 La RPA Self-Consistante

4.2.1 Choix de l'opérateur d'excitation RPA

Pour tenir compte des corrélations dans l'état fondamental RPA, nous avons montré dans le chapitre précedent que l'opérateur d'excitation RPA doit avoir la forme suivante :

$$Q_\nu^\dagger = \sum_\alpha X_\alpha^\nu A_\alpha^\dagger - Y_\alpha^\nu A_\alpha \tag{4.1}$$

où $A_\alpha^\dagger$ peut être un opérateur d'excitation ph ou pp. Par conséquent, les états excités $|\nu\rangle$ de notre système peuvent être obtenus à partir de l'état fondamental $|\mathrm{RPA}\rangle$ comme suit :

$$|\nu\rangle = Q_\nu^\dagger |\mathrm{RPA}\rangle. \tag{4.2}$$

L'état fondamental RPA est défini implicitement comme étant le vide des opérateurs de destruction Q_ν :

$$Q_\nu |\mathrm{RPA}\rangle = 0, \quad \forall \nu. \tag{4.3}$$

Avec cette définition on remarque que :

$$\langle \mathrm{RPA}|\nu\rangle = \langle \mathrm{RPA}|Q_\nu^\dagger|\mathrm{RPA}\rangle \equiv 0 \tag{4.4}$$

ce qui montre que $|\nu\rangle$ est automatiquement orthogonal à l'état fondamental RPA. Puisque les opérateurs Q_ν et $Q_\nu^\dagger$ peuvent s'écrire matriciellement en fonction des opérateurs $A_\alpha^\dagger$ et A_α comme suit :

$$\sum_\nu \begin{pmatrix} Q_\nu \\ Q_\nu^\dagger \end{pmatrix} = \sum_{\nu,\alpha} \begin{pmatrix} X_\alpha^{\nu^*} & -Y_\alpha^{\nu^*} \\ -Y_\alpha^\nu & X_\alpha^\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_\alpha \\ A_\alpha^\dagger \end{pmatrix}, \tag{4.5}$$

on constate alors que l'inversion de la matrice de passage U :

$$U = \sum_{\nu,\alpha} \begin{pmatrix} X_\alpha^{\nu^*} & -Y_\alpha^{\nu^*} \\ -Y_\alpha^\nu & X_\alpha^\nu \end{pmatrix}, \tag{4.6}$$

permet d'exprimer les opérateurs $A_\alpha^\dagger$ et A_α en fonction des Q_ν et $Q_\nu^\dagger$:

$$\sum_\alpha \begin{pmatrix} A_\alpha \\ A_\alpha^\dagger \end{pmatrix} = \sum_{\alpha,\nu} \begin{pmatrix} X_\alpha^\nu & Y_\alpha^{\nu^*} \\ Y_\alpha^\nu & X_\alpha^{\nu^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_\nu \\ Q_\nu^\dagger \end{pmatrix}. \tag{4.7}$$

Or, en général, la matrice U n'est pas inversible. Il faut alors des conditions garantissant son inversion.

En tenant compte du fait que les états excités doivent être orthonormalisés à l'aide de (4.2) et (4.3), on obtient la condition suivante :

$$\langle\nu|\nu'\rangle = \langle \mathrm{RPA}|Q_\nu Q_{\nu'}^\dagger|\mathrm{RPA}\rangle = \langle \mathrm{RPA}|[Q_\nu, Q_{\nu'}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle = \delta_{\nu\nu'}. \tag{4.8}$$

En utilisant (4.1) on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle \mathrm{RPA}|[Q_\nu, Q_{\nu'}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle &= \sum_{\alpha,\alpha'} \Big(X_\alpha^{\nu^*} X_{\alpha'}^{\nu'} \langle RPA|[A_\alpha, A_{\alpha'}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle \\ &+ Y_\alpha^{\nu^*} Y_{\alpha'}^{\nu'} \langle RPA|[A_\alpha^\dagger, A_{\alpha'}]|\mathrm{RPA}\rangle \Big). \end{aligned} \tag{4.9}$$

On remarque donc que, pour conserver l'orthonormalisation des états excités $|\nu\rangle$ dans l'opérateur d'excitation RPA on doit choisir des opérateurs d'excitations $A_\alpha^\dagger$ normalisés, $\langle \mathrm{RPA}|[A_\alpha, A_{\alpha'}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle = \delta_{\alpha,\alpha'}$. On obtient alors :

$$\langle \mathrm{RPA}|[Q_\nu, Q_{\nu'}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle = \sum_{\alpha,\alpha'} \Big(X_\alpha^{\nu^*} X_{\alpha'}^{\nu'} - Y_\alpha^{\nu^*} Y_{\alpha'}^{\nu'} \Big) \delta_{\alpha,\alpha'}. \tag{4.10}$$

Il est important de remarquer qu'on ne peut pas incorporer dans l'opérateur d'excitation RPA des composantes hermitiques (diagonales) comme l'operateur nombre de particules, puisque cela empêche l'orthonormalisation des états excités. Autrement dit, dans ce cas l'inversion de la matrice de passage U est impossible et on ne peut plus utiliser la méthode SCRPA. Cela constitue la seule restriction sur l'opérateur d'excitation RPA. Les relations d'orthonormalisation sont donc données par :

$$\sum_\alpha \Big(X_\alpha^{\nu^*} X_\alpha^{\nu'} - Y_\alpha^{\nu^*} Y_\alpha^{\nu'} \Big) = \delta_{\nu\nu'} \tag{4.11}$$

Avec ce choix de normalisation des opérateurs d'excitation, les relations de fermeture peuvent s'écrire :

$$\sum_\nu \Big(X_\alpha^\nu X_{\alpha'}^{\nu^*} - Y_\alpha^\nu Y_{\alpha'}^{\nu^*} \Big) = \delta_{\alpha,\alpha'}. \tag{4.12}$$

En tenant compte de ces deux conditions, l'inversion de l'opérateur d'excitation RPA est garantie.

Il reste un dernier point à discuter relatif au choix de l'opérateur d'excitation RPA. Ce point concerne le problème de la restauration de symétrie spontanément brisée. Comme nous l'avons vu auparavant, à l'aide des relations de fermetures et d'orthonormalisation l'inversion de l'opérateur d'excitation RPA est immédiate. Ainsi, toutes les valeurs moyennes à deux corps peuvent être calculées. Par conséquent, si l'opérateur correspondant à la symétrie brisée peut être incorporé dans l'opérateur RPA, alors la restauration de cette symétrie est totale. On peut citer l'exemple du modèle de Lipkin à trois niveaux, où la symétrie de rotation (dont l'opérateur est hermitique) est brisée et sa restauration a été réalisée d'une façon parfaite. En général, l'opérateur de symétrie nombre de particules est hermitique (voir les modèles que nous envisageons d'étudiés) ; on ne peut alors pas l'incorporer dans l'opérateur RPA. Pour surmonter ce problème, nous envisageons de généraliser la démarche suivie dans le chapitre 2, où la symétrie nombre de particules a été rétablie par l'introduction d'un paramètre de Lagrange. Il est bien connu que, dans la méthode SCRPA et aussi dans toutes les méthodes de type champ moyen, où nous introduisons un paramètre de Lagrange, la symétrie n'est pas parfaitement restaurée; il suffit de calculer la variance du nombre de particules pour montrer cela. Cependant, grâce à la souplesse de la méthode SCRPA, nous allons essayer d'introduire un second paramètre de Lagrange fixant la valeur moyenne du carré de l'opérateur de symétrie à sa valeur exacte. Cela permet d'ailleurs, d'introduire plus de corrélations dans l'état fondamental et aussi dans les états excités, d'une manière controlée. Nous allons appliquer cette méthode dans le cas du modèle de la séniorité.

4.2.2 Les équations RPA

Afin de montrer d'une manière claire l'analogie entre la méthode SCRPA et la théorie HF ordinaire, nous allons établir les équations RPA à l'aide d'un schéma de minimisation proposé par Baranger (Bar70). Suivant la méthode de Baranger, pour établir les équations HF, on définit une énergie moyenne à une particule ϵ_μ comme suit :

$$\epsilon_\nu = \frac{\sum_{\mu,k}\left\{(E_\mu^{N+1}-E_0^N)|\langle N,0|\varphi_k^\nu a_k|N+1,\mu\rangle|^2+(E_0^N-E_\mu^{N-1})|\langle N,0|\varphi_k^{\nu^*}a_k^\dagger|N-1,\mu\rangle|^2\right\}}{\sum_{\mu,k}\left\{|\langle N,0|\varphi_k^\nu a_k|N+1,\mu\rangle|^2+|\langle N,0|\varphi_k^{\nu^*}a_k^\dagger|N-1,\mu\rangle|^2\right\}} \tag{4.13}$$

où E_μ^N, $E_\mu^{N\pm1}$, $|N\pm1,\mu\rangle$ et $|N,\mu\rangle$ sont, en principe, les valeurs propres et les vecteurs propres exacts du Hamiltonien H du système à N particules. Pour l'état fondamental on a $\mu=0$ et $a_k^\dagger$ est un opérateur de création à une particule. Puisque dans la méthode de HF, on ne s'intéresse qu'aux excitations à une particule, on peut introduire alors un opérateur d'excitation à une particule :

$$q_\nu^\dagger = \sum_k \varphi_k^\nu a_k^\dagger \tag{4.14}$$

qui permet de reécrire l'equation (4.13) comme suit :

$$\epsilon_\nu = \frac{\langle N,0|\{q_\nu,[H,q_\nu^\dagger]\}|N,0\rangle}{\langle N,0|\{q_\nu,q_\nu^\dagger\}|N,0\rangle} \tag{4.15}$$

($\{\ldots,\ldots\}$ est un anticommutateur). Par conséquent, la minimisation de (4.13) ou de (4.15) par rapport aux amplitudes $\varphi_k^{\nu^*}$ (ou par rapport à φ_k^ν, mais non les deux en en même temps) nous donne le résultat déjà obtenu dans le chapitre précédent :

$$\epsilon_\nu\langle N,0|\{\delta q_\nu,q_\nu^\dagger\}|N,0\rangle = \langle N,0|\{\delta q_\nu,[H,q_\nu^\dagger]\}|N,0\rangle. \tag{4.16}$$

En tenant compte du fait que :

$$\delta q_\nu = \sum_k \delta\varphi_k^{\nu^*} a_k \tag{4.17}$$

et de l'équation (4.14) on obtient le résultat bien connu de la méthode HF :

$$\sum_{k'}\langle N,0|\{a_k,[H,a_{k'}^\dagger]\}|N,0\rangle\varphi_{k'}^\nu = \epsilon_\nu\varphi_k^\nu \tag{4.18}$$

où le vide $|N,0\rangle$ dans ce cas se revèle être un déterminant de Slater.

Considérons maintenant un autre type d'excitation élémentaire du système comme les vibrations de densités. Dans la méthode SCRPA, tout comme dans la méthode RPA standard, l'opérateur d'excitation RPA est donné par :

$$Q_\nu^\dagger = \sum_\alpha X_\alpha^\nu A_\alpha^\dagger - Y_\alpha^\nu A_\alpha. \tag{4.19}$$

Par analogie avec (4.13) l'énergie d'excitation moyenne est donnée par :

$$\Omega_\nu = \frac{\sum_\mu\left((E_\mu^N - E_0^N)|\langle N,\mu|Q_\nu^\dagger|N,0\rangle|^2 - (E_0^N - E_\mu^N)|\langle N,0|Q_\nu|N,\mu\rangle|^2\right)}{\sum_\mu\left(|\langle N,\mu|Q_\nu^\dagger|N,0\rangle|^2 - |\langle N,0|Q_\nu|N,\mu\rangle|^2\right)} \tag{4.20}$$

où E_μ^N, E_0^N, $|N,\mu\rangle$ et $|N,0\rangle$ sont, en principe, les valeurs propres et les vecteurs propres de H. Comme cela a été déjà montré, l'équation (4.20) peut s'écrire sous la forme :

$$\Omega_\nu = \frac{\langle N,0|[Q_\nu,[H,Q_\nu^\dagger]]|N,0\rangle}{\langle N,0|[Q_\nu,Q_\nu^\dagger]]|N,0\rangle} \tag{4.21}$$

La minimisation de la valeur moyenne de l'énergie d'excitation Ω_ν par rapport aux amplitudes X^{ν^*} et Y^{ν^*} nous donne :

$$\Omega_\nu\langle N,0|[\delta Q_\nu,Q_\nu^\dagger]|N,0\rangle = \langle N,0|[\delta Q_\nu,[H,Q_\nu^\dagger]]|N,0\rangle \tag{4.22}$$

où $\delta Q_\nu = \sum_\alpha \delta X_\alpha^{\nu^*} A_\alpha^\dagger - \delta Y_\alpha^{\nu^*} A_\alpha$. Par conséquent, on retrouve bien le résultat de la méthode des équations du mouvement. De plus, puisqu'on a deux types de vibrations $A_\alpha^\dagger$ et A_α, l'équation (4.22) nous donne l'ensemble d'équations suivant :

$$\begin{aligned}\langle N,0|[A_\alpha,[H,Q_\nu^\dagger]]|N,0\rangle &= \Omega_\nu\langle N,0|[A_\alpha,Q_\nu^\dagger]|N,0\rangle\\ \langle N,0|[A_\alpha^\dagger,[H,Q_\nu^\dagger]]|N,0\rangle &= \Omega_\nu\langle N,0|[A_\alpha^\dagger,Q_\nu^\dagger]|N,0\rangle\end{aligned} \tag{4.23}$$

où le vide $|N,0\rangle$ correspond maintenant à l'état fondamental $|\mathrm{RPA}\rangle$. Avec ce dernier résultat, on peut remarquer clairement l'analogie entre la méthode SCRPA et la théorie HF ordinaire, puisque la SCRPA peut être vue comme étant une extension de la méthode HF aux cas des fonctions de corrélations à deux corps. En tenant compte de (4.1) on peut donc expliciter l'ensemble des équations de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha'}\left\{\langle[A_\alpha,[H,A_{\alpha'}^\dagger]]\rangle X_{\alpha'}^\nu - \langle[A_\alpha,[H,A_{\alpha'}]]\rangle Y_{\alpha'}^\nu\right\} &= \Omega_\nu\sum_{\alpha'}\langle[A_\alpha,A_{\alpha'}^\dagger]\rangle X_{\alpha'}^\nu\\ \sum_{\alpha'}\left\{\langle[A_\alpha^\dagger,[H,A_{\alpha'}^\dagger]]\rangle X_{\alpha'}^\nu - \langle[A_\alpha^\dagger,[H,A_{\alpha'}]]\rangle Y_{\alpha'}^\nu\right\} &= -\Omega_\nu\sum_{\alpha'}\langle[A_\alpha^\dagger,A_{\alpha'}]\rangle Y_{\alpha'}^\nu\end{aligned} \tag{4.24}$$

où $\langle\ldots\rangle = \langle\mathrm{RPA}|\ldots|RPA\rangle$. En utilisant le fait que l'opérateur d'excitation RPA est normalisé, on peut encore simplifier les équations précédentes :

$$\sum_{\alpha'}\left\{\langle[A_\alpha,[H,A_{\alpha'}^\dagger]]\rangle X_{\alpha'}^\nu - \langle[A_\alpha,[H,A_{\alpha'}]]\rangle Y_{\alpha'}^\nu\right\} = \Omega_\nu X_\alpha^\nu$$

$$\sum_{\alpha'} \Big\{ -\langle [A^\dagger_\alpha, [H, A^\dagger_{\alpha'}]]\rangle X^\nu_{\alpha'} + \langle [A^\dagger_\alpha, [H, A_{\alpha'}]]\rangle Y^\nu_{\alpha'} \Big\} = -\Omega_\nu Y^\nu_\alpha. \tag{4.25}$$

Par conséquent, ce système, qui constitue le système d'équations RPA, s'écrit matriciellement comme suit :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} = \Omega_\nu \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} \tag{4.26}$$

où les éléments des matrices A et B sont données par :

$$A_{\alpha,\alpha'} = \langle [A_\alpha, [H, A^\dagger_{\alpha'}]]\rangle, \tag{4.27a}$$
$$B_{\alpha,\alpha'} = -\langle [A_\alpha, [H, A_{\alpha'}]]\rangle \tag{4.27b}$$

et les amplitudes RPA par :

$$X^\nu_\alpha = \langle [A_\alpha, Q^\dagger_\nu]\rangle \tag{4.28a}$$
$$Y^\nu_\alpha = \langle [A^\dagger_\alpha, Q^\dagger_\nu]\rangle. \tag{4.28b}$$

Nous avons ainsi établi le système d'équations SCRPA. Il est non-linéaire puisque les matrices RPA A et B sont des fonctions des amplitudes RPA X^ν et Y^ν. Néanmoins, grâce à l'inversion de l'opérateur d'excitation RPA et la condition définissant le vide RPA, on peut calculer toutes les fonctions de corrélations à deux corps. De plus, le fait que le vide RPA est inconnu ne pose pas de problème : on ne se sert, en pratique, jamais de ce vide. Par ailleurs, il est aussi intéressant de remarquer que les équations (4.1), (4.22) et (4.26) sont équivalentes à :

$$\langle [Q_\nu, [H, Q^\dagger_{\nu'}]]\rangle = \Omega_\nu \delta_{\nu,\nu'} \tag{4.29}$$
$$\langle [Q^\dagger_\nu, [H, Q^\dagger_{\nu'}]]\rangle = 0. \tag{4.30}$$

4.3 Conclusion

En conclusion, la méthode SCRPA consiste à résoudre les équations de la méthode EMM au niveau des corrélations à deux particules d'une manière self-consistante. Ainsi, elle peut être vue comme étant une méthode self-consistante de type champ moyen à deux particules. Bien que dans cette méthode nous avons introduit des corrélations dans l'état fondamental, nous ayons pu fermer le système d'équations sans recours à des approximations supplémentaires. En effet, l'état fondamental RPA sur lequel repose tout le calcul SCRPA est, en général, inconnu. Cependant, à l'aide des relations de fermeture et d'orthonormalisation nous avons pu surmonter cette difficulté. En fait, ces relations permettent l'inversion de l'opérateur d'excitation RPA. Par conséquent, à l'aide de la condition définissant l'état fondamental nous pouvons calculer toutes les valeurs moyennes dans cette état en fonction des amplitudes RPA. Nous obtenons de cette manière un système d'équations non-linéaires dont les inconnus sont les amplitudes RPA. Pour résoudre ce système il nous faut opérer par itérations successives jusqu'à la convergence.

Chapitre 5

Brisure et restauration de symétrie

5.1 Symétries et champ moyen

Le cas des noyaux à couches totalement remplies constitue un cas spécial dans la théorie de champ moyen (HF). Dans ce cas particulier les solutions HF conservent toujours le bon nombre quantique (moment cinétique). Par conséquent, la méthode HF conserve dans ce cas la symétrie de rotation. En général, puisque la fonction d'onde HF n'est pas une fonction propre du Hamiltonien total H, ni les orbitales individuelles, ni le déterminant de Slater possèdent le bon nombre quantique (moment cinétique). La fonction d'onde HF n' est fonction propre que de la partie monoparticulaire du Hamiltonien, c'est-à-dire H_0. On peut exprimer le Hamiltonien total du système comme une somme du Hamiltonien HF et d'une partie "résiduelle" V_{res} :

$$H = H_0 + V_{res}. \tag{5.1}$$

On note que cela ne signifie pas que H_0 et V_{res} séparément possèdent toutes les symétries de H. Cependant, nous rappelons que H_0 est une fonction de l'ensemble des orbitales occupées $\{\varphi_i\}$ (voir chapitre 1). Si les opérateurs de symétrie $\hat{S}$ qui commutent avec H (c'est-à-dire $[H, \hat{S}] = 0$) gardent l'ensemble $\{\varphi_i\}$ invariant (*i.e.* $\hat{S}\{\varphi_i\} = \{\varphi_i\}$), alors il s'en suit qu'ils commutent avec H_0 (c'est-à-dire $[H_0, \hat{S}] = 0$).

5.2 Brisure spontanée de symétrie

En physique nucléaire, on travaille habituellement avec des Hamiltoniens (exemple : modèle en couches) qui brisent explicitement un certain nombre de symétries qui sont par contre conservées par le Hamiltonien de départ H (3.1). Nous avons :

$$[H, \hat{P}] = [H, \hat{J}^2] = [H, \hat{N}] = \cdots = 0 \tag{5.2}$$

où $\hat{P}$, $\hat{J}$ et $\hat{N}$ sont respectivement les opérateurs du moment total (invariance par translation), du moment cinétique (invariance par rotation), du nombre de particules (bon nombre de particules), etc. Le Hamiltonien du modèle en couches, c'est-à-dire du champ moyen H_0 (Hartree-Fock) ou de Hartree-Fock-Bogoliubov peut briser toutes ces symétries :

$$[H_0, \hat{P}] \neq 0; [H_0, \hat{J}^2] \neq 0; [H_0, \hat{N}] \neq 0; \cdots \tag{5.3}$$

Le Hamiltonien du champ moyen brise toujours la symétrie de translation. De plus, il peut briser la symétrie de rotation (noyaux déformés), ne pas conserver un bon nombre de particules (noyaux superfluides), ne pas être invariant par rapport à un changement de parité (noyaux avec

déformation octupolaire), etc. Durant ce chapitre nous insistons sur le fait que toutes ces brisures de symétries sont intimement liées à ce que l'on appelle les transitions de phases qui, elles, sont déclenchées par un mode collectif qui devient (en fonction d'un paramètre physique) de plus en plus mou.

Ainsi, on peut s'imaginer que la brisure de symétrie nombre de particules c'est-à-dire la non conservation du bon nombre de particules, est liée à la transition de phase normale-superfluide qui est déclenchée par un mode mou qui est la vibration des paires. La brisure de l'invariance de translation est liée à la transition de phase gaz-liquide et au processus de fragmentation qui est déclenchée par des fluctuations de densité dans le gaz.

Il faut rappeler que la notion de transition de phases est strictement valable uniquement dans un système infini (c'est-à-dire macroscopique) et que dans des systèmes finis, c'est-à-dire avec un petit nombre de particules, les transitions de phases sont toujours plus ou moins lavées. Ainsi, travailler avec des Hamiltoniens qui brisent les symétries n'a un sens et peut éventuellement nous amener à une description exacte du système que pour les systèmes macroscopiques. Pour des systèmes à un nombre de plus en plus petit de particules autrement dit des systèmes microscopiques, l'introduction d'un Hamiltonien qui brise les symétries a de moins en moins un sens. Néanmoins, comme nous le savons, même pour des noyaux aussi petits que $A \simeq 20$, le modèle en couche peut être encore une approximation très valable. Ceci nous amène à la question de savoir si travailler avec un Hamiltonien qui brise un certain nombre de symétries peut être une bonne approximation et si surtout, lorsque $A \to \infty$, nous pouvons avoir une théorie avec symétrie brisée qui devient de plus en plus précise et qui peut devenir exacte, ce que nous allons démontrer dans le cadre de certains modèles. Pour des petits nombres de particules où l'approximation du champ moyen devient de plus en plus mauvaise, il peut s'avérer nécessaire de restaurer les symétries.

La brisure de symétrie et la brisure spontanée de symétrie peut être, considérée comme une fluctuation locale dans l'espace et dans le temps, c'est-à-dire qu'un paquet d'ondes, comportant initialement peu de particules pour des raisons énergétiques envahit tout le système et devient macroscopique. A ce moment, le paquet d'ondes caractérisé par sa position et son impulsion est piégé car il ne peut plus s'étaler et la brisure de symétrie devient permanente, on parle donc de symétrie spontanément brisée.

Les brisures de symétries ne sont pas seulement utiles pour inclure un certain nombre de corrélations dans l'ordre le plus bas de la théorie. Elles le sont également pour identifier l'existence et la nature des modes collectifs de basse énergie. En effets, les corrélations associées à ces brisures de symétries dans l'état fondamental sont caractéristiques des modes selon lesquels le système sera le plus facilement excité. Par exemple, un noyau dont l'état fondamental se déforme spontanément à l'approximation de champ moyen, présentera des excitations collectives rotationnelles.

5.3 Restauration de symétrie

Comme nous l'avons annoncé à plusieurs reprises, dans le cas des systèmes finis, au niveau des approximations de type champ moyen, la symétrie est artificiellement brisée ; c'est pour cette raison que nous allons discuter maintenant sa restauration. Cette restauration consiste à extraire du paquet d'ondes (solutions champ moyen) la composante avec le bon nombre quantique. C'est la technique de projection, qui est un cas particulier de la méthode de la coordonnée génératrice (RS80). Le concept de base de la méthode de projection est la diagonalisation du Hamiltonien total H dans le sous-espace sous-tendu par un ensemble des fonctions $|\phi(\alpha)\rangle$, qui dependent d'une ou plusieurs paramètres continues α. Cet espace s'appelle le "sous-espace collectif". Considérons un groupe de symétrie engendré par les opérateurs de symétries S_i qui commutent avec le Hamiltonien H et un état $|\phi\rangle$ solution du problème champ moyen qui brise la symétrie. En appliquant tous les éléments $R(\alpha)$ du groupe de symétrie sur l'état $|\phi\rangle$ on obtient un ensemble continue des fonctions :

$$|\phi(\alpha)\rangle = R(\alpha)|\phi\rangle \tag{5.4}$$

où le paramètre α parcourt la totalité de l'espace des paramètres du groupe de symétrie. De plus, les énergies moyennes sur tous les états $|\phi(\alpha)\rangle$ sont égales. En suivant Peierls et Yoccoz (PY57),

on peut utiliser une superposition de ces états $|\phi(\alpha)\rangle$ comme fonction d'essai :

$$\begin{aligned} |\psi_k\rangle &= \int_\alpha F^k(\alpha)|\phi(\alpha)\rangle d\alpha \\ &= \sum_\alpha f_\alpha^k |\phi(\alpha)\rangle \end{aligned} \tag{5.5}$$

où la seconde égalité traduit la discrétisation de la "coordonnée collective" α nécessaire à toute application pratique (RS80), tandis que k est un nombre quantique caractérisant les états à N corps obtenus. Pour terminer, les états $|\phi(\alpha)\rangle$ et les coefficients f_α^k peuvent être obtenues par la minimisation de l'énergie :

$$\begin{aligned} E_{proj} &= \frac{\langle\psi_k|H|\psi_k\rangle}{\langle\psi_k|\psi_k\rangle} \\ &= \frac{\sum_{\alpha,\beta} f_\beta^{k^*} f_\alpha^k \langle\phi(\beta)|H|\phi(\alpha)\rangle}{\sum_{\alpha,\beta} f_\beta^{k^*} f_\alpha^k \langle\phi(\beta)|\phi(\alpha)\rangle}. \end{aligned} \tag{5.6}$$

L'approximation de champ moyen correspond au cas où un seul coefficient de mélange f_α^k est non nul.

5.3.1 Projection sur le nombre de particules

Nous avons discuté dans la section précédente les avantages liés aux brisures de symétries au niveau du champ moyen ainsi que le cas où une restauration de celles-ci est nécessaire. Les modes mous associés aux brisures de symétries correspondent à des mouvements collectifs de grande amplitude particulière. En ce sens, la restauration de symétries brisées au niveau du champ moyen (RS80) entre dans le cadre des mélanges de configurations défini par les équations (5.5) et (5.6). Ces équations traduisent alors l'utilisation de la dégénérescence des fonctions de champ moyen $|\phi_0(\alpha)\rangle$ brisant une symétrie donnée pour construire une fonction propre du générateur infinitésimal du groupe de symétrie associé. Nous allons traiter explicitement le cas de la symétrie nombre de particules mais le principe reste toujours le même pour toutes les autres symétries brisées. Rappelons de nouveau que la projection a un sens uniquement pour les systèmes finis. Dans le cas de la projection sur le bon nombre de particules, nous rétablissons la symétrie associée à l'invariance du Hamiltonien sous les rotations dans l'espace de jauge ; c'est-à-dire sous les transformations d'un groupe de symétrie à un paramètre. Dans ce cas, le mélange de configuration défini précédemment, se met sous la forme particulière :

$$|\psi_N\rangle = \hat{P}_N|\phi_0(0)\rangle, \tag{5.7}$$

où,

$$\hat{P}_N = \frac{1}{2n}\sum_{\alpha=-n}^{n} e^{i\pi\alpha(\hat{N}-N)/n} \tag{5.8}$$

est le projecteur sur l'état propre de $\hat{N}$ de valeur propre N, $|\phi_0(0)\rangle$ est une fonction de champ moyen brisant la symétrie (déterminant de Slater) et $2n$ est le nombre d'intervalles utilisés lors de l'intégration sur la variable de jauge. Cela permet de faire le lien avec les notations introduites précédemment en posant :

$$f_\alpha^N = \frac{e^{-i\pi\alpha N/n}}{2n}, \tag{5.9}$$

et

$$|\phi_0(\alpha)\rangle = R(\alpha)|\phi_0(0)\rangle = e^{-i\pi\alpha N/n}|\phi_0(0)\rangle. \tag{5.10}$$

L'opérateur $R(\alpha)$ parcourt tout le groupe de symétrie associé à l'invariance du Hamiltonien à la différence près que α est discret. La nécessité que ψ_N soit un état propre du générateur du

groupe de symétrie (c'est-à-dire l'opérateur nombre de particules dans ce cas) fixe les coefficients de mélange f_α^N lorsque ce groupe est abélien (RS80). En vertu de la commutation de H avec $\hat{P}_N$ et de la propriété $\hat{P}_N^2 = \hat{P}_N$ satisfaite par ce projecteur, l'énergie projetée (5.6) prend la forme :

$$E_{proj} = \frac{\langle\phi_0(0)|H\hat{P}_N|\phi_0(0)\rangle}{\langle\phi_0(0)|\hat{P}_N|\phi_0(0)\rangle}. \tag{5.11}$$

Malheureusement la résolution du problème variationnel basé sur ψ_N n'est pas trivial. Cela est du au fait que les fonctions projetées sont hautement correlées. Ainsi pour aboutir à des schémas systématiques d'approximation, il est intéressant d'étudier les intégrales de recouvrement qui entrent en jeux dans la minimisation de l'énergie projetée (Sch86). Dans une étude détaillée de ces intégrales de recouvrement, Schuck (RS80; Sch86) a montré que l'énergie projetée peut être développée comme suit :

$$E_{proj}(m) = \sum_{n=0}^{m} h_n(m)(N - \langle\hat{N}\rangle)^n. \tag{5.12}$$

De plus, cette étude aboutit au résultat important que, dans le cas de forte brisure de symétrie, *i.e.* de fluctuations en $\hat{N}$ fortes, l'ordre le plus bas de la méthode de projection, appelé "méthode de Cranking", est suffisant (Sch86). L'ordre le plus bas dans (5.12) correspond à :

$$\begin{aligned} E_{proj}(1) &= \sum_{n=0}^{1} h_n(1)(N - \langle\hat{N}\rangle)^n \\ &= h_0(1) + h_1(1)(N - \langle\hat{N}\rangle) \end{aligned} \tag{5.13}$$

où,

$$h_0(1) = \langle H\rangle, \qquad h_1(1) = \frac{\langle H\Delta\hat{N}\rangle}{\langle(\Delta\hat{N})^2\rangle}. \tag{5.14}$$

L'énergie projetée est alors donnée par :

$$E_{proj}(1) = \langle\phi_0(0)|H - h_1(1)\hat{N}|\phi_0(0)\rangle + h_1(1)N. \tag{5.15}$$

Le calcul variationnel nous amène à l'équation suivante :

$$\delta E_{proj}(1) = \frac{\delta\langle H\rangle}{\delta\phi_0(0)} - h_1(1)\frac{\delta\langle\hat{N}\rangle}{\delta\phi_0(0)} + (N - \langle\hat{N}\rangle)\frac{h_1(1)}{\delta\phi_0(0)} = 0 \tag{5.16}$$

admettant comme solution l'équation du Cranking :

$$\delta E_{proj}(1) = \delta\langle\phi_0(0)|H - \mu\hat{N}|\phi_0(0)\rangle \tag{5.17}$$

avec $\langle\hat{N}\rangle = N$ et $h_1(1) = \mu$. Nous avons donc abouti au résultat que, pour les cas de forte brisure de symétrie, les équations de Cranking sont équivalentes pour l'énergie du fondamental, à une théorie avec projection. Nous remarquons que travailler dans l'approximation de Cranking peut être vu comme un changement de référentiel : on passe du référentiel du laboratoire au référentiel intrinsèque du système. C'est ainsi que nous procéderons en régime déformé pour les approximations du champ moyen et au-delà.

5.4 Mode spurieux

Dans cet paragraphe nous allons étudier l'impact de la brisure spontanée de symétries au niveau de champ moyen sur la méthode RPA standard. Pour cela nous supposons que le Hamiltonien à deux corps exact H est invariant sous l'action d'une opération de symétrie continue, engendrée

par un opérateur à un corps hermitique $\hat{P}$. Nous supposons que la solution champ moyen viole cette symétrie. Cela signifie que la matrice densité à une particule HF ρ_0 ne commute pas avec $\hat{P}$:

$$[\rho_0, \hat{P}] \neq 0. \tag{5.18}$$

Par conséquent, dans la base HF où ρ_0 est diagonale, les éléments $(p-h)$ de la matrice de $\hat{P}$ ne sont pas tous nuls. Cependant, puisque le Hamiltonien exact commute avec $\hat{P}$:

$$[H, \hat{P}] = 0 \tag{5.19}$$

$\hat{P}$ est alors une solution exacte mais spurieuse des équations RPA standard :

$$\langle [\delta\hat{P}, [H, \hat{P}]] = 0. \tag{5.20}$$

Donc sous condition que l'on travaille dans la base HF, les équations RPA engendrent un mode spurieux. De plus, en tenant compte des relations d'orthonormalisation des solutions RPA, nous remarquons que la solution spurieuse n'est pas normalisable, par conséquent, les amplitudes RPA relatives à cette solution sont infinies.

Deuxième partie

Phénomène d'appariement. Modèle à deux et à un niveaux

Introduction

Dans cette partie nous nous intéressons à l'étude d'un phénomène parmi les phénomènes quantiques les plus spectaculaires à savoir la transition à l'état superfluide ou supraconducteur dans les systèmes fermioniques. Cela peut être rencontré par exemple dans les métaux, les étoiles à neutrons, les noyaux finis, l'Helium liquide et il est aussi activement cherché dans les systèmes de fermions atomiques piégés magnétiquement. Dans cette étude nous nous intéressons à la description de la superfluidité dans les systèmes fermioniques à partir d'une approche microscopique self-consistante. Ainsi, nous allons appliquer la méthode SCRPA à deux modèles exactement solubles. Le modèle d'appariement à deux niveaux, à déjà servi pour tester d'autres approximations de type champ moyen, comme, par exemple, les méthodes RPA standard et plusieurs de ces extensions : HF, BCS (HF61; Joh70; PTPK98; SDD99; HB00a). Il constitue aussi un bon candidat pour tester la méthode SCRPA sous sa version quasi-particule (SCQRPA) (DS96). A cet égard, nous rappelons que Dukelsky *et al.* (DRS98) ont déjà testé la version particule-particule de la méthode SCRPA sur ce modèle ; ils ont obtenu de très bons résultats pour l'énergie du fondamental. Dans ce travail, nous envisageons de compléter cette étude et d'analyser les résultats concernant les modes d'excitations. Ensuite, nous étendrons notre étude dans la phase superfluide dans l'espoir d'avoir de bons résultats. Nous présenterons alors une étude détaillée de la transition de phase normale/superfluide où nous discuterons le problème du mode mou qui enclenche la brisure de la symétrie nombre de particules. Nous exposerons aussi une nouvelle méthode de calcul des nombres d'occupation.

Afin de compléter notre description de la superfluidité des systèmes fermioniques, nous envisageons aussi traiter un deuxième modèle dit modèle de la séniorité (RS80). J. Dukelsky et P. Schuck sont les premiers à avoir appliqué la méthode SCQRPA avec une seule contrainte (DS96) à ce modèle ; ils ont aussi obtenu de bons résultats. Nous envisageons, cependant, d'étudier de nouveau ce modèle pour réexaminer l'interprétation des énergies d'excitations corrigées et non corrigées. De plus, afin de mieux contrôler les corrélations d'appariement nous proposons ajouter une autre contrainte éliminant les fluctuations dans le calcul du nombre de particules.

Chapitre 1

Présentation du modèle

Le modèle d'appariement (pairing) à deux niveaux est un modèle exactement soluble. En physique nucléaire, il est utilisé souvent pour tester les approximations effectuées pour l'étude des problèmes à N particules. Il a été d'abord employé pour tester l'approximation RPA standard et sa capacité à décrire les corrélations de l'état fondamental et aussi les vibrations de paire de particules dans la phase normale ainsi que dans la phase superfluide. Ce modèle est composé de deux couches dégénérées de même spin J, espacées de l'énergie à une particule ϵ et dont la dégénérescence de chacune est égale à $2\Omega = 2J + 1$. Le Hamiltonien du modèle est donné par :

$$H = \frac{\epsilon}{2} \sum_j j \hat{N}_j - g\Omega \sum_{jj'} A_j^\dagger A_{j'}, \quad j = \pm 1 \tag{1.1}$$

où g est une constante de couplage, j prend les valeurs 1 pour le niveau supérieur et -1 pour le niveau inférieur. $\hat{N}_j$ et $A_j^\dagger$ sont les opérateurs nombre de particules et création de paires de particules dans le niveau j, respectivement. Ils sont donnés par :

$$A_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m=1}^{\Omega} a_{jm}^\dagger a_{j\bar{m}}^\dagger, \tag{1.2}$$

$$\hat{N}_j = \sum_{m=1}^{\Omega} (a_{jm}^\dagger a_{jm} + a_{j\bar{m}}^\dagger a_{j\bar{m}}) \tag{1.3}$$

où $a_{jm}^\dagger$ cré une particule dans le niveau j, m est la projection du spin suivant z et $a_{j\bar{m}} = (-1)^{J-m} a_{j-m}$. Les opérateurs $\hat{N}_j$, $A_j^\dagger$ et A_j obéissent aux relations de commutations suivantes :

$$\begin{aligned} [A_j, A_{j'}^\dagger] &= \delta_{jj'} \left(1 - \frac{\hat{N}_j}{\Omega}\right), \\ [\hat{N}_j, A_{j'}^\dagger] &= 2\delta_{jj'} A_j^\dagger, \\ [\hat{N}_j, A_{j'}] &= -2\delta_{jj'} A_j. \end{aligned} \tag{1.4}$$

Ils définissent ainsi, une algèbre $SU(2)$ pour chaque niveau j ; par conséquent le modèle à deux niveaux satisfait une algèbre $SU(2) \times SU(2)$. Grâce à la structure de cette algèbre, on peut facilement trouver les états orthonormalisés de la base qui sous-tendent le sous-espace de Hilbert des paires de particules. Par exemple, pour un système à mi-remplissage, dont le nombre total de particules N est égal à la moitié de la dégénéréscence totale du système ($N = 2\Omega$), la base est donnée par :

$$|n\rangle = \frac{\Omega^{\frac{\Omega}{2}}}{\Omega!} (A_1^\dagger)^n (A_{-1}^\dagger)^{\Omega - n} |0\rangle, \quad 0 \leqslant n \leqslant \Omega \tag{1.5}$$

où n est le nombre de paires de particules dans le niveau supérieur. Dans ce cas, la matrice Hamiltonienne est tridiagonale de dimension $\Omega + 1$, ayant les éléments de matrices suivants :

$$h_{n,n} = \langle n|H|n\rangle = \epsilon(2n-\Omega) - g(2\Omega n - 2n^2 + \Omega), \tag{1.6}$$

$$h_{n-1,n} = \langle n-1|H|n\rangle = -gn(\Omega - n + 1) \tag{1.7}$$

Hors mi-remplissage, on peut diagonaliser le Hamiltonien dans une base plus générale défini par :

$$|k\rangle = \frac{\Omega^{\frac{\tilde{\Omega}}{2}}}{\Omega!}\sqrt{\frac{(\Omega-\tilde{\Omega}+k)!(\Omega-k)!}{k!(\tilde{\Omega}-k)!}}(A_1^\dagger)^k(A_{-1}^\dagger)^{\tilde{\Omega}-k}|0\rangle, \quad 0 \leqslant k \leqslant \tilde{\Omega} \tag{1.8}$$

où on retrouve le cas mi-remplissage en choisissant $\tilde{\Omega} = \Omega$. La matrice Hamiltonienne est tridiagonale de dimension $\tilde{\Omega}+1$; ses éléments sont donnés par :

$$h_{k,k} = \langle k|H|k\rangle = \epsilon(2k-\tilde{\Omega}) - g(2k\tilde{\Omega} - 2k^2 + \tilde{\Omega}\Omega - \tilde{\Omega}^2 + \tilde{\Omega}), \tag{1.9}$$

$$h_{k-1,k} = \langle k-1|H|k\rangle = -g\sqrt{k(\Omega-(k-1))(\Omega-\tilde{\Omega}+k)(\tilde{\Omega}-k+1)}. \tag{1.10}$$

Le nombre de particules est donné par $N = 2\tilde{\Omega}$.

Chapitre 2

Phase superfluide

La phase superfluide dans ce modèle est la région où la symétrie associée au nombre total de particules N est spontanément brisée. Par conséquent, une méthode de type champ moyen des quasi-particules est indispensable pour réaliser l'étude dans cette phase. De plus, puisque nous étudions un système fini, comme nous l'avons expliqué à plusieurs reprise, la symétrie n'est pas réellement brisée et sa restauration est cruciale. Dans ce chapitre nous présentons l'application de la version quasi-particule de la méthode SCRPA (SCQRPA) à ce modèle.

2.1 Transformation de Bogoliubov

Dans la phase superfluide, la force d'appariement du système est suffisamment forte de façon à ce que les corrélations des particules, dont les états sont à temps renversé, deviennent assez fortes : il y a formation de paires (quasi-particules). Il est alors pertinent d'utiliser la représentation quasi-particules des opérateurs. De plus, cette représentation diagonalise une partie du Hamiltonien. La base de Bogoliubov constitue donc un très bon choix. En effectuant alors une transformation de Bogoliubov sur les opérateurs de particules $a^\dagger_{j,m}$ et $a_{j,\bar{m}}$, on peut écrire :

$$\alpha^\dagger_{j,m} = u_j a^\dagger_{j,m} - v_j a_{j,\bar{m}}, \tag{2.1}$$

$$\alpha^\dagger_{j,\bar{m}} = u_j a^\dagger_{j,\bar{m}} + v_j a_{j,m} \tag{2.2}$$

où :

$$u_j^2 + v_j^2 = 1, \quad j = \pm 1. \tag{2.3}$$

Afin d'effectuer l'opération inverse et d'exprimer les opérateurs de particules $a_{j,m}$ et $a_{j,\bar{m}}$ en fonction des opérateurs de quasi-particules $\alpha_{j,m}$ et $\alpha_{j,\bar{m}}$, il est commode de mettre (2.2) sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \alpha^\dagger_{j,m} \\ \alpha_{j,\bar{m}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_j & -v_j \\ v_j & u_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^\dagger_{j,m} \\ a_{j,\bar{m}} \end{pmatrix}. \tag{2.4}$$

Par inversion on obtient :

$$a^\dagger_{j,m} = u_j \alpha^\dagger_{j,m} + v_j \alpha_{j,\bar{m}}, \tag{2.5}$$

$$a^\dagger_{j,\bar{m}} = u_j \alpha^\dagger_{j,\bar{m}} - v_j \alpha_{j,m}. \tag{2.6}$$

On peut définir les opérateurs de paire de quasi-particules P_j et de nombre de quasi-particules $\hat{N}_{q,j}$ dans la nouvelle base dite de quasi-particules ou base déformée :

$$P^\dagger_j = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m>0} \alpha^\dagger_{j,m} \alpha^\dagger_{j,\bar{m}}, \quad P_j = (P^\dagger_j)^\dagger$$

$$\hat{N}_{q,j} = \sum_{m>0} (\alpha^\dagger_{j,m}\alpha_{j,m} + \alpha^\dagger_{j,\bar{m}}\alpha_{j,\bar{m}}). \tag{2.7}$$

Les opérateurs $P^\dagger_j$, P_j et $\hat{N}_{q,j}$ obéissent aux règles de commutation suivantes :

$$\begin{aligned} [P_j, P^\dagger_{j'}] &= \delta_{jj'}\left(1 - \frac{\hat{N}_{q,j}}{\Omega}\right), \\ [\hat{N}_j, P^\dagger_{j'}] &= 2\delta_{jj'}P^\dagger_j, \\ [\hat{N}_j, P_{j'}] &= -2\delta_{jj'}P_j. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Ainsi, pour chaque niveau j, les opérateurs paire de quasi-particules définissent une algèbre $SU(2)$. Enfin, on exprime les opérateurs paire de particules à l'aide des opérateurs paire de quasi-particules :

$$\begin{aligned} A^\dagger_j &= u_j^2 P^\dagger_j - v_j^2 P_j - \frac{u_j v_j}{\sqrt{\Omega}}\hat{N}_{q,j} + u_j v_j\sqrt{\Omega}, \\ A_j &= u_j^2 P_j - v_j^2 P^\dagger_j - \frac{u_j v_j}{\sqrt{\Omega}}\hat{N}_{q,j} + u_j v_j\sqrt{\Omega}, \\ \hat{N}_j &= (u_j^2 - v_j^2)\hat{N}_{q,j} + 2\Omega v_j^2 + 2u_j v_j\sqrt{\Omega}(P^\dagger_j + P_j). \end{aligned} \tag{2.9}$$

2.2 Opérateur nombre total de particules

L'opérateur nombre total de particules :

$$\hat{N} = \sum_j \hat{N}_j \tag{2.10}$$

peut être explicité dans la nouvelle base car $\hat{N}_j$ est donné par :

$$\hat{N}_j = (u_j^2 - v_j^2)\hat{N}_{q,j} + 2\Omega v_j^2 + 2u_j v_j\sqrt{\Omega}(P^\dagger_j + P_j), \quad j = \pm 1. \tag{2.11}$$

On peut aussi exprimer le carré de l'opérateur nombre total de particule dans la base des quasi-particules :

$$\begin{aligned} \hat{N}^2 &= (\hat{N}_1 + \hat{N}_{-1})^2 \\ &= \hat{N}_1^2 + \hat{N}_{-1}^2 + 2\hat{N}_1\hat{N}_{-1} \end{aligned} \tag{2.12}$$

où :

$$\begin{aligned} \hat{N}_j^2 &= (u_j^2 - v_j^2)^2\hat{N}_{q,j}^2 + 4v_j^2(\Omega(u_j^2 - v_j^2) - u_j^2)\hat{N}_{q,j} + 4\Omega u_j^2 v_j^2(P^\dagger_j P^\dagger_j + P_j P_j) \\ &+ 8\Omega u_j^2 v_j^2 P^\dagger_j P_j + 4\sqrt{\Omega}u_j v_j(u_j^2 - v_j^2)(P^\dagger_j\hat{N}_{q,j} + \hat{N}_{q,j}P_j) \\ &+ 4\sqrt{\Omega}u_j v_j(2\Omega v_j^2 + (u_j^2 - v_j^2))(P^\dagger_j + P_j) + 4\Omega v_j^2(u_j^2 + \Omega v_j^2), \\ 2\hat{N}_1\hat{N}_{-1} &= 2(u_1^2 - v_1^2)(u_{-1}^2 - v_{-1}^2)\hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1} \\ &+ 4\Omega v_{-1}^2(u_1^2 - v_1^2)\hat{N}_{q,1} + 4\Omega v_1^2(u_{-1}^2 - v_{-1}^2)\hat{N}_{q,-1} \\ &+ 8\Omega u_1 v_1 u_{-1} v_{-1}(P^\dagger_1 P^\dagger_{-1} + P_{-1}P_1 + P^\dagger_1 P_{-1} + P^\dagger_{-1}P_1) \\ &+ 4\sqrt{\Omega}u_1 v_1(u_{-1}^2 - v_{-1}^2)(P^\dagger_1\hat{N}_{q,-1} + \hat{N}_{q,-1}P_1) \\ &+ 4\sqrt{\Omega}u_{-1}v_{-1}(u_1^2 - v_1^2)(P^\dagger_{-1}\hat{N}_{q,1} + \hat{N}_{q,1}P_{-1}) \\ &+ 8\Omega\sqrt{\Omega}u_1 v_1 v_{-1}^2(P^\dagger_1 + P_1) + 8\Omega\sqrt{\Omega}u_{-1}v_{-1}v_1^2(P^\dagger_{-1} + P_{-1}) \\ &+ 8\Omega^2 v_1^2 v_{-1}^2. \end{aligned} \tag{2.13}$$

Par conséquent, on peut calculer la variance du nombre total de particule ΔN défini par :

$$(\Delta N)^2 = \langle\hat{N}^2\rangle - \langle\hat{N}\rangle^2. \tag{2.14}$$

où,

$$\begin{aligned}
\langle\hat{N}\rangle &= (u_1^2-v_1^2)\langle\hat{N}_{q,1}\rangle + (u_{-1}^2-v_{-1}^2)\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle + 2\Omega(v_1^2+v_{-1}^2)\\
\langle\hat{N}^2\rangle &= (u_1^2-v_1^2)^2\langle\hat{N}_{q,1}^2\rangle + (u_{-1}^2-v_{-1}^2)^2\langle\hat{N}_{q,-1}^2\rangle\\
&+ 2(u_1^2-v_1^2)(u_{-1}^2-v_{-1}^2)\langle\hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1}\rangle + 4v_1^2(\Omega(u_1^2-v_1^2)-u_1^2)\langle\hat{N}_{q,1}\rangle\\
&+ 4v_{-1}^2(\Omega(u_{-1}^2-v_{-1}^2)-u_{-1}^2)\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle + 4\Omega v_{-1}^2(u_1^2-v_1^2)\langle\hat{N}_{q,1}\rangle\\
&+ 4\Omega v_1^2(u_{-1}^2-v_{-1}^2)\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle + 4\Omega u_1^2v_1^2(\langle P_1^\dagger P_1^\dagger\rangle + \langle P_1P_1\rangle) + 8\Omega u_1^2v_1^2\langle P_1^\dagger P_1\rangle\\
&+ 4\Omega u_{-1}^2v_{-1}^2(\langle P_{-1}^\dagger P_{-1}^\dagger\rangle + \langle P_{-1}P_{-1}\rangle) + 8\Omega u_{-1}^2v_{-1}^2\langle P_{-1}^\dagger P_{-1}\rangle\\
&+ 8\Omega u_1v_1u_{-1}v_{-1}(\langle P_1^\dagger P_{-1}^\dagger\rangle + \langle P_{-1}P_1\rangle + \langle P_1^\dagger P_{-1}\rangle + \langle P_{-1}^\dagger P_1\rangle)\\
&+ 4\Omega v_1^2(u_1^2+\Omega v_1^2) + 4\Omega v_{-1}^2(u_{-1}^2+\Omega v_{-1}^2) + 8\Omega^2v_1^2v_{-1}^2. \qquad (2.15)
\end{aligned}$$

La variance ΔN mesure les fluctuations de l'opérateur nombre total de particules dans la phase superfluide. Elle constitue donc un moyen pour contrôler la restauration de la symétrie.

2.3 Hamiltonien

Dans la zone superfluide où le nombre total de particules n'est pas conservé, on doit utiliser le Hamiltonien du modèle plus un terme de contrainte qui fixe la valeur moyenne de la symétrie perdue à sa valeur exacte. Le Hamiltonien contraint est donc donné par :

$$H' = H - \mu\hat{N} \qquad (2.16)$$

où μ est la contrainte et $\hat{N}$ est l'opérateur nombre total de particules. Dans la base des quasi-particules et en ordre normal le Hamiltonien contraint est donné par :

$$H' = H'_{00} + H'_{11} + H'_{20} + H'_{22} + H'_{31} + H'_{40} + H'_{11-11} \qquad (2.17)$$

où les termes H_{mn} représentent les termes de type $(\alpha^\dagger)^m\alpha^n$ ou $(\alpha^\dagger)^n\alpha^m$ et H_{11-11} représente les termes de type $\alpha^\dagger\alpha\alpha^\dagger\alpha$. Les expressions de différents termes constituant le Hamiltonien sont donnés comme suit :

$$\begin{aligned}
H'_{00} &= h_0, \qquad (2.18)\\
H'_{11} &= h_1\hat{N}_{q,1} + h_{-1}\hat{N}_{q,-1}, \qquad (2.19)\\
H'_{20} &= h_2(P_1^\dagger + P_1) + h_{-2}(P_{-1}^\dagger + P_{-1}), \qquad (2.20)\\
H'_{22} &= h_3P_1^\dagger P_1 + h_{-3}P_{-1}^\dagger P_{-1} + h_4(P_1^\dagger P_{-1} + P_{-1}^\dagger P_1), \qquad (2.21)\\
H'_{31} &= h_5(P_1^\dagger\hat{N}_{q,1} + \hat{N}_{q,1}P_1) + h_{-5}(P_{-1}^\dagger\hat{N}_{q,-1} + \hat{N}_{q,-1}P_{-1}) \qquad (2.22)\\
&+ h_6(P_1^\dagger\hat{N}_{q,-1} + \hat{N}_{q,-1}P_1) + h_{-6}(P_{-1}^\dagger\hat{N}_{q,1} + \hat{N}_{q,1}P_{-1}) \qquad (2.23)\\
H'_{40} &= h_7(P_1^\dagger P_1^\dagger + P_1P_1) + h_{-7}(P_{-1}^\dagger P_{-1}^\dagger + P_{-1}P_{-1}) + h_8(P_1^\dagger P_{-1}^\dagger + P_{-1}P_1) \qquad (2.24)\\
H'_{11-11} &= h_9\hat{N}_{q,1}^2 + h_{-9}\hat{N}_{q,-1}^2 + h_{10}\hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1} \qquad (2.25)
\end{aligned}$$

avec,

$$\begin{aligned}
h_0 &= (\epsilon-2\mu)\Omega v_1^2 - g\Omega(\Omega u_1^2v_1^2 + v_1^4) - (\epsilon+2\mu)\Omega v_{-1}^2 - g\Omega(\Omega u_{-1}^2v_{-1}^2 + v_{-1}^4)\\
&- 2g\Omega^2u_1v_1u_{-1}v_{-1},\\
h_1 &= (\frac{\epsilon}{2}-\mu)(u_1^2-v_1^2) + g\Omega(2u_1^2v_1^2 + \frac{v_1^4}{\Omega}) + 2g\Omega u_1v_1u_{-1}v_{-1},\\
h_{-1} &= -(\frac{\epsilon}{2}+\mu)(u_{-1}^2-v_{-1}^2) + g\Omega(2u_{-1}^2v_{-1}^2 + \frac{v_{-1}^4}{\Omega}) + 2g\Omega u_{-1}v_{-1}u_1v_1,\\
h_2 &= \sqrt{\Omega}u_1v_1(\epsilon-2\mu) - g\Omega\left\{u_1v_1(u_1^2-v_1^2)\sqrt{\Omega} + \frac{2u_1v_1^3}{\sqrt{\Omega}}\right\} - g\Omega\sqrt{\Omega}u_{-1}v_{-1}(u_1^2-v_1^2),
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
h_{-2} &= -\sqrt{\Omega}u_{-1}v_{-1}(\epsilon+2\mu) - g\Omega\left\{u_{-1}v_{-1}(u_{-1}^2 - v_{-1}^2)\sqrt{\Omega} + \frac{2u_{-1}v_{-1}^3}{\sqrt{\Omega}}\right\} \\
&- g\Omega\sqrt{\Omega}u_1v_1(u_{-1}^2 - v_{-1}^2), \\
h_3 &= -g\Omega(u_1^4 + v_1^4), \\
h_{-3} &= -g\Omega(u_{-1}^4 + v_{-1}^4), \\
h_4 &= -g\Omega(u_1^2u_{-1}^2 + v_1^2v_{-1}^2), \\
h_5 &= g\sqrt{\Omega}u_1v_1(u_1^2 - v_1^2), \\
h_{-5} &= g\sqrt{\Omega}u_{-1}v_{-1}(u_{-1}^2 - v_{-1}^2), \\
h_6 &= g\sqrt{\Omega}u_{-1}v_{-1}(u_1^2 - v_1^2), \\
h_{-6} &= g\sqrt{\Omega}u_1v_1(u_{-1}^2 - v_{-1}^2), \\
h_7 &= g\Omega u_1^2v_1^2, \\
h_{-7} &= g\Omega u_{-1}^2v_{-1}^2, \\
h_8 &= g\Omega(u_1^2v_{-1}^2 + u_{-1}^2v_1^2), \\
h_9 &= -gu_1^2v_1^2, \\
h_{-9} &= -gu_{-1}^2v_{-1}^2, \\
h_{10} &= -2gu_1v_1u_{-1}v_{-1}.
\end{aligned} \tag{2.26}
$$

Ayant exprimé le Hamiltonien contraint dans la base des quasi-particules, nous pouvons obtenir l'énergie du fondamental :

$$E_{gs} = \langle H' \rangle + \mu\langle \hat{N} \rangle \tag{2.27}$$

2.4 La QRPA Self-Consistante

2.4.1 Opérateurs d'excitation RPA et vide RPA

L'état fondamental RPA est défini par la relation :

$$Q_\nu|\mathrm{RPA}\rangle = 0, \quad \nu = 1,2, \tag{2.28}$$

ce qui montre que l'état fondamental RPA est le vide des opérateurs d'excitation RPA, $Q_\nu^\dagger$. L'opérateur d'excitation QRPA, qui peut être vu comme une transformation de Bogoliubov des opérateurs de paire de fermions [1], est défini à l'aide d'une combinaison linéaire des opérateurs $\bar{P}_1^\dagger$, $\bar{P}_{-1}^\dagger$, $\bar{P}_1$ et $\bar{P}_{-1}$ comme suit :

$$Q_\nu^\dagger = \sum_{j=\pm1} X_{j,\nu}\bar{P}_j^\dagger - Y_{j,\nu}\bar{P}_j, \ \nu = 1,2, \tag{2.29}$$

où :

$$\bar{P}_j = \frac{P_j}{\sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \rangle}{\Omega}}}, \ j = \pm 1. \tag{2.30}$$

Nous avons introduit cette nouvelle normalisation des opérateurs paire de quasi-particules pour avoir des états excités normalisés $\langle \nu|\nu' \rangle = \delta_{\nu,\nu'}$. Les opérateurs $P_1^\dagger$ et $P_{-1}^\dagger$ créent une paire de quasi-particules dans les niveaux 1 et -1 respectivement, alors que P_1 et P_{-1} détruisent une paire de quasi-particules dans les niveaux 1 et -1 respectivement. Le problème est donc un problème à quatre dimensions qui peut être formulé matriciellement comme suit :

$$\begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_1^\dagger \\ Q_2^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{1,1} & X_{-1,1} & -Y_{1,1} & -Y_{-1,1} \\ X_{1,2} & X_{-1,2} & -Y_{1,2} & -Y_{-1,2} \\ -Y_{1,1} & -Y_{-1,1} & X_{1,1} & X_{-1,1} \\ -Y_{1,2} & -Y_{-1,2} & X_{1,2} & X_{-1,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{P}_1 \\ \bar{P}_{-1} \\ \bar{P}_1^\dagger \\ \bar{P}_{-1}^\dagger \end{pmatrix} \tag{2.31}$$

[1] On ne peut pas inclure les termes hermitiques $\hat{N}_{q,j}$ de (2.11), puisqu'ils conduisent à des états propres non normalisables comme dans le cas des modes de Goldstone.

Pour pouvoir calculer les fonctions de corrélations qui apparaissent dans le système d'équations RPA, il faudrait que l'opérateur d'excitation RPA soit inversible. Les relations qui garantissent l'inversion de Q_ν sont les relations de fermeture et d'orthonormalisation qui peuvent être explicitement données par :

Relations d'ortho-normalisation

$$\sum_{j=\pm 1} X^2_{j,\nu} - Y^2_{j,\nu} = 1, \quad \nu = 1,2$$

$$X_{-1,1}X_{-1,2} + X_{1,1}X_{1,2} - Y_{-1,1}Y_{-1,2} - Y_{1,1}Y_{1,2} = 0,$$
$$X_{1,2}Y_{1,1} + X_{-1,2}Y_{-1,1} - X_{1,1}Y_{1,2} - X_{-1,1}Y_{-1,2} = 0.$$

Relations de fermeture

$$\sum_{\nu=1,2} X^2_{j,\nu} - Y^2_{j,\nu} = 1, \quad j = \pm 1$$

$$X_{-1,1}X_{1,1} + X_{-1,2}X_{1,2} - Y_{-1,1}Y_{1,1} - Y_{-1,2}Y_{1,2} = 0,$$
$$X_{1,1}Y_{-1,1} + X_{1,2}Y_{-1,2} - X_{-1,1}Y_{1,1} - X_{-1,2}Y_{1,2} = 0. \tag{2.32}$$

Avec ces relations on peut donc inverser l'opérateur d'excitation RPA :

$$\begin{pmatrix} \bar{P}_1 \\ \bar{P}_{-1} \\ \bar{P}^\dagger_1 \\ \bar{P}^\dagger_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} & Y_{1,1} & Y_{1,2} \\ X_{-1,1} & X_{-1,2} & Y_{-1,1} & Y_{-1,2} \\ Y_{1,1} & Y_{1,2} & X_{1,1} & X_{1,2} \\ Y_{-1,1} & Y_{-1,2} & X_{-1,1} & X_{-1,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q^\dagger_1 \\ Q^\dagger_2 \end{pmatrix} \tag{2.33}$$

Nous pouvons, à l'aide de ce que nous avons déjà explicité, calculer les relations de commutation des opérateurs RPA Q_ν et $Q^\dagger_{\nu'}$:

$$[Q_\nu, Q^\dagger_{\nu'}] = (X_{1,\nu}X_{1,\nu'} - Y_{1,\nu}Y_{1,\nu'})\frac{1 - \frac{\hat{N}_{q,1}}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} + (X_{-1,\nu}X_{-1,\nu'} - Y_{-1,\nu}Y_{-1,\nu'})\frac{1 - \frac{\hat{N}_{q,-1}}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}},$$

$$[Q^\dagger_\nu, Q^\dagger_{\nu'}] = (X_{1,\nu'}Y_{1,\nu} - X_{1,\nu}Y_{1,\nu'})\frac{1 - \frac{\hat{N}_{q,1}}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} + (X_{-1,\nu'}Y_{-1,\nu} - X_{-1,\nu}Y_{-1,\nu'})\frac{1 - \frac{\hat{N}_{q,-1}}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}},$$

$$[Q_\nu, Q_{\nu'}] = (Y_{1,\nu'}X_{1,\nu} - X_{1,\nu'}Y_{1,\nu})\frac{1 - \frac{\hat{N}_{q,1}}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} + (Y_{-1,\nu'}X_{-1,\nu} - X_{-1,\nu'}Y_{-1,\nu})\frac{1 - \frac{\hat{N}_{q,-1}}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}},$$

2.4.2 Matrice RPA

Suivant la méthode exposée dans la deuxième partie, les équations SCQRPA sont obtenues en minimisant la règle de somme suivante :

$$\Omega_\nu = \frac{\langle [Q_\nu, [H', Q^\dagger_\nu]]\rangle}{\langle [Q_\nu, Q^\dagger_\nu]\rangle} \tag{2.34}$$

par rapport aux amplitudes $X_{j,\nu}$ and $Y_{j,\nu}$ dans l'opérateur Q_ν. On obtient alors les équations suivantes :

$$\langle [\delta Q, [H', Q^\dagger_\nu]]\rangle = \Omega_\nu \langle [\delta Q, Q^\dagger_\nu]\rangle. \tag{2.35}$$

En utilisant l'expression de l'opérateur d'excitation RPA, $Q^\dagger_\nu$, on obtient la forme matricielle des équations SCQRPA :

$$\mathcal{S}\mathcal{X}_\nu = \Omega_\nu \mathcal{N}\mathcal{X}_\nu \tag{2.36}$$

où Ω_ν sont les modes d'excitation RPA alors que $\mathcal{N}$ et $\mathcal{X}_\nu$ sont la matrice de normalisation (qui dépend de la norme choisie dans l'opérateur d'excitation RPA) et le vecteur constitué des amplitudes RPA, respectivement. Explicitement ils sont donnés par :

$$\mathcal{N} = \begin{pmatrix} \langle[\bar{P}_1, \bar{P}_1^\dagger]\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle[\bar{P}_{-1}, \bar{P}_{-1}^\dagger]\rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\langle[\bar{P}_1, \bar{P}_1^\dagger]\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\langle[\bar{P}_{-1}, \bar{P}_{-1}^\dagger]\rangle \end{pmatrix}, \; \mathcal{X}_\nu = \begin{pmatrix} X_{1,\nu} \\ X_{-1,\nu} \\ Y_{1,\nu} \\ Y_{-1,\nu} \end{pmatrix} \tag{2.37}$$

où, $\langle[\bar{P}_1, \bar{P}_1^\dagger]\rangle = 1$ et $\langle[\bar{P}_{-1}, \bar{P}_{-1}^\dagger]\rangle = 1$. En multipliant à gauche par l'inverse de la matrice norme on peut ramener le problème à la résolution du problème aux valeurs propres suivant :

$$\begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & B_{1,1} & B_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & B_{2,1} & B_{2,2} \\ -B_{1,1} & -B_{1,2} & -A_{1,1} & -A_{1,2} \\ -B_{2,1} & -B_{2,2} & -A_{2,1} & -A_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{1,\nu} \\ X_{-1,\nu} \\ Y_{1,\nu} \\ Y_{-1,\nu} \end{pmatrix} = \Omega_\nu \begin{pmatrix} X_{1,\nu} \\ X_{-1,\nu} \\ Y_{1,\nu} \\ Y_{-1,\nu} \end{pmatrix} \tag{2.38}$$

avec :

$$\begin{aligned} A_{1,1} &= \langle[\bar{P}_1, [H', \bar{P}_1^\dagger]]\rangle, \; A_{1,2} = \langle[\bar{P}_1, [H', \bar{P}_{-1}^\dagger]]\rangle \\ A_{2,1} &= \langle[\bar{P}_{-1}, [H', \bar{P}_1^\dagger]]\rangle, \; A_{2,2} = \langle[\bar{P}_{-1}, [H', \bar{P}_{-1}^\dagger]]\rangle \\ B_{1,1} &= -\langle[\bar{P}_1, [H', \bar{P}_1]]\rangle, \; B_{1,2} = -\langle[\bar{P}_1, [H', \bar{P}_{-1}]]\rangle \\ B_{2,1} &= -\langle[\bar{P}_{-1}, [H', \bar{P}_1]]\rangle, \; B_{2,2} = -\langle[\bar{P}_{-1}, [H', \bar{P}_{-1}]]\rangle. \end{aligned} \tag{2.39}$$

Les expressions des éléments de la matrice RPA sont données explicitement par :

$$\begin{aligned} A_{1,1} &= 2h_1 + h_3\Big\{ -\frac{2}{\Omega}\frac{\langle P_1^\dagger P_1\rangle}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} + \frac{1-\frac{2\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}_{q,1}^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} \Big\} \\ &- \frac{2}{\Omega}\frac{1}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}}\Big\{ h_4\langle P_{-1}^\dagger P_1\rangle + 2h_7\langle P_1 P_1\rangle + h_8\langle P_{-1}P_1\rangle \Big\} \\ &+ 4h_9\Big\{ \frac{\langle P_1^\dagger P_1\rangle + \langle P_1 P_1^\dagger\rangle}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} + \frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,1}^2\rangle}{\Omega}}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} \Big\} + 2h_{10}\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} \\ A_{1,2} &= A_{2,1} = h_4\frac{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle+\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega^2}}{\sqrt{\big(1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}\big)\big(1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}\big)}} + 4h_{10}\frac{\langle P_1 P_{-1}^\dagger\rangle}{\sqrt{\big(1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}\big)\big(1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}\big)}} \\ A_{2,2} &= 2h_{-1} + h_{-3}\Big\{ -\frac{2}{\Omega}\frac{\langle P_{-1}^\dagger P_{-1}\rangle}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}} + \frac{1-\frac{2\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}} \Big\} \\ &- \frac{2}{\Omega}\frac{1}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}\Big\{ h_4\langle P_1^\dagger P_{-1}\rangle + 2h_{-7}\langle P_{-1}P_{-1}\rangle + h_8\langle P_1 P_{-1}\rangle \Big\} \\ &+ 4h_{-9}\Big\{ \frac{\langle P_{-1}^\dagger P_{-1}\rangle + \langle P_{-1}P_{-1}^\dagger\rangle}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}} + \frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,-1}^2\rangle}{\Omega}}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}} \Big\} + 2h_{10}\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}} \\ B_{1,1} &= -\frac{2}{\Omega}\frac{1}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}}\Big\{ h_3\langle P_1 P_1\rangle + h_4\langle P_{-1}P_1\rangle + h_8\langle P_{-1}^\dagger P_1\rangle \Big\} + 8h_9\frac{\langle P_1 P_1\rangle}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} \\ &+ 2h_7\Big\{ -\frac{1}{\Omega}\frac{\langle P_1^\dagger P_1\rangle + \langle P_1 P_1^\dagger\rangle}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} + \frac{1-\frac{2\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}_{q,1}^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} \Big\} \\ B_{1,2} &= B_{2,1} = h_8\frac{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle+\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega^2}}{\sqrt{\big(1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}\big)\big(1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}\big)}} + 4h_{10}\frac{\langle P_{-1}P_1\rangle}{\sqrt{\big(1-\frac{\langle \hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}\big)\big(1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}\big)}} \end{aligned}$$

$$B_{2,2} = -\frac{2}{\Omega}\frac{1}{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}\Big\{h_{-3}\langle P_{-1}P_{-1}\rangle + h_4\langle P_1P_{-1}\rangle + h_8\langle P_1^\dagger P_{-1}\rangle\Big\} + 8h_{-9}\frac{\langle P_{-1}P_{-1}\rangle}{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}$$
$$+ 2h_{-7}\Big\{-\frac{1}{\Omega}\frac{\langle P_{-1}^\dagger P_{-1}\rangle + \langle P_{-1}P_{-1}^\dagger\rangle}{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}} + \frac{1-\frac{2\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle\hat{N}^2_{q,-1}\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}\Big\}. \quad (2.40)$$

2.4.3 Minimisation de l'énergie

Appliquons le principe variationnel et minimisons la valeur moyenne dans l'état RPA du Hamiltonien contraint (2.16) par rapport aux paramètres de la transformation de Bogoliubov u_j et v_j :

$$\frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial u_j} + \frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial v_j}\frac{\partial v_j}{\partial u_j} = 0, \quad j = \pm 1 \quad (2.41)$$

où $\langle H'\rangle$ est la valeur moyenne de H' dans l'état RPA ; il est donné par :

$$\begin{aligned}\langle H'\rangle &= h_0 + h_1\langle\hat{N}_{q,1}\rangle + h_{-1}\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle + h_3\langle P_1^\dagger P_1\rangle + h_{-3}\langle P_{-1}^\dagger P_{-1}\rangle \\ &+ 2h_4\langle P_1^\dagger P_{-1}\rangle + 2h_7\langle P_1^\dagger P_1^\dagger\rangle + 2h_{-7}\langle P_{-1}^\dagger P_{-1}^\dagger\rangle + 2h_8\langle P_1^\dagger P_{-1}^\dagger\rangle \\ &+ h_9\langle\hat{N}^2_{q,1}\rangle + h_{-9}\langle\hat{N}^2_{q,-1}\rangle + h_{10}\langle\hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1}\rangle, \end{aligned} \quad (2.42)$$

les coefficients h_n sont déjà définis dans (2.26). Tout d'abord, on doit noter que si (2.41) est évaluée en utilisant l'état fondamental BCS, alors elle conduit aux équations BCS usuelles. Nous devons aussi signaler que la minimisation de $\langle H'\rangle$ par rapport à u_j et v_j est strictement équivalente aux relations suivantes :

$$\langle[H', \bar{P}_j^\dagger]\rangle = \langle[H', \bar{P}_j]\rangle = \langle[H', Q_\nu^\dagger]\rangle = \langle[H', Q_\nu]\rangle = 0 \quad (2.43)$$

qui sont automatiquement vérifiées dans la méthode SCQRPA et aussi plus généralement dans la méthode des équations de mouvement. Les équations (2.43) sont appelées "les équations du champ moyen généralisé". On parle de champ moyen généralisé puisqu'on obtient des équations de type champ moyen "standard" couplées aux équations SCQRPA par l'intermédiaire des amplitudes RPA. Dans ce qui suit, je vais utiliser les relations (2.43) et à la fin de cette section je présenterai le résultat de la minimisation de $\langle H'\rangle$ par rapport à u_j et v_j. Le calcul des valeurs moyennes des commutateurs $\langle[H', \bar{P}_j^\dagger]\rangle$ nous donne les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}\langle[H', \bar{P}_1^\dagger]\rangle &= h_2\sqrt{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}} + \frac{h_5}{\sqrt{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}}}\Big(2(\langle P_1^\dagger P_1^\dagger\rangle + \langle P_1^\dagger P_1\rangle) + \langle\hat{N}_{q,1}\rangle - \frac{\langle\hat{N}^2_{q,1}\rangle}{\Omega}\Big) \\ &+ \frac{2h_{-6}}{\sqrt{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}}}\Big(\langle P_{-1}^\dagger P_1^\dagger\rangle + \langle P_{-1}P_1^\dagger\rangle\Big) + h_6\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle - \frac{\langle\hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}{\sqrt{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}}} = 0, \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned}\langle[H', \bar{P}_{-1}^\dagger]\rangle &= h_{-2}\sqrt{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}} + \frac{h_{-5}}{\sqrt{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}}\Big(2(\langle P_{-1}^\dagger P_{-1}^\dagger\rangle + \langle P_{-1}^\dagger P_{-1}\rangle) \\ &+ \langle\hat{N}_{q,-1}\rangle - \frac{\langle\hat{N}^2_{q,-1}\rangle}{\Omega}\Big) + \frac{2h_6}{\sqrt{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}}\Big(\langle P_1^\dagger P_{-1}^\dagger\rangle + \langle P_1 P_{-1}^\dagger\rangle\Big) \\ &+ h_{-6}\frac{\langle\hat{N}_{q,1}\rangle - \frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\hat{N}_{q,1}\rangle}{\Omega}}{\sqrt{1-\frac{\langle\hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}} = 0, \end{aligned} \quad (2.45)$$

qui, après simplification et arrangement, peuvent se mettre sous la forme d'équations pour les amplitudes u_j et v_j :

$$2\xi_j u_j v_j + \Delta_j(v_j^2 - u_j^2) = 0, \qquad j = \pm 1. \tag{2.46}$$

Ces équations ont la forme standard des équations de champ moyen (équations BCS). En tenant compte de la relation de normalisation $u_j^2 + v_j^2 = 1$, on peut écrire ces équations sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} \xi_j & \Delta_j \\ \Delta_j & -\xi_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_j \\ v_j \end{pmatrix} = E_j \begin{pmatrix} u_j \\ v_j \end{pmatrix} \tag{2.47}$$

où E_j, Δ_j et ξ_j sont respectivement, l'énergie de quasi-particules, $E_j = \sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}$, le gap et l'énergie à une particule. Pour chaque niveau j, les expressions du gap et de l'énergie à une particule sont données comme suit :

$$\begin{aligned}
\xi_j &= (j\frac{\epsilon}{2} - g v_j^2) + \frac{g}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \rangle}{\Omega}} (u_{-j}^2 - v_{-j}^2)\big(\langle P_j^\dagger P_{-j}^\dagger \rangle + \langle P_j^\dagger P_{-j} \rangle\big) - \mu, \\
\Delta_j &= g\Omega \sum_{j=\pm 1} u_j v_j - \frac{g u_j v_j}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \rangle}{\Omega}} \left\{ 2\big(\langle P_j^\dagger P_j^\dagger \rangle + \langle P_j^\dagger P_j \rangle\big) + \langle \hat{N}_{q,j} \rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,j}^2 \rangle}{\Omega} \right\} \\
&- g u_{-j} v_{-j} \frac{\langle \hat{N}_{q,-j} \rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \hat{N}_{q,-j} \rangle}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \rangle}{\Omega}}
\end{aligned} \tag{2.48}$$

Les solutions des équations (2.41) sont données par :

$$\begin{aligned}
u_j^2 &= \frac{1}{2}(1 \pm \frac{\xi_j}{\sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}}), \\
v_j^2 &= \frac{1}{2}(1 \pm \frac{\xi_j}{\sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}})
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Sachant que $u_1^2 = v_{-1}^2 = 1$ et $u_{-1}^2 = v_1^2 = 0$ à la limite Hartree-Fock, on a donc :

$$\begin{aligned}
u_j^2 &= \frac{1}{2}(1 + \frac{\xi_j}{\sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}}), \\
v_j^2 &= \frac{1}{2}(1 - \frac{\xi_j}{\sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}})
\end{aligned} \tag{2.50}$$

Cependant, on doit remarquer que, à l'aide des équations (2.46), (2.48) et (2.50), on peut retrouver la forme usuelle de l'équation du gap dans un calcul BCS. En introduisant l'interaction renormalisée $\tilde{g}$:

$$\tilde{g} = \begin{pmatrix} \tilde{g}_{1,1} & \tilde{g}_{1,-1} \\ \tilde{g}_{-1,1} & \tilde{g}_{-1,-1} \end{pmatrix}, \tag{2.51}$$

avec,

$$\begin{aligned}
\tilde{g}_{1,1} &= g\Omega - \frac{g}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,1} \rangle}{\Omega}} \left\{ 2\big(\langle P_1^\dagger P_1^\dagger \rangle + \langle P_1^\dagger P_1 \rangle\big) + \langle \hat{N}_{q,1} \rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,1}^2 \rangle}{\Omega} \right\} \\
\tilde{g}_{1,-1} &= g\Omega - g \frac{\langle \hat{N}_{q,-1} \rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,1} \hat{N}_{q,-1} \rangle}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,1} \rangle}{\Omega}} \\
\tilde{g}_{-1,1} &= g\Omega - g \frac{\langle \hat{N}_{q,1} \rangle - \frac{\langle \hat{N}_{q,1} \hat{N}_{q,-1} \rangle}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,-1} \rangle}{\Omega}}
\end{aligned}$$

$$\tilde{g}_{-1,-1} = g\Omega - \frac{g}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,-1}\rangle}{\Omega}}\left\{2\big(\langle P^\dagger_{-1}P^\dagger_{-1}\rangle + \langle P^\dagger_{-1}P_{-1}\rangle\big) + \langle \hat{N}_{q,-1}\rangle - \frac{\langle \hat{N}^2_{q,-1}\rangle}{\Omega}\right\}. \quad (2.52)$$

On peut écrire l'équation du gap suivante :

$$\Delta_i = \sum_j \tilde{g}_{ij}u_jv_j = \frac{1}{2}\sum_j \tilde{g}_{ij}\frac{\Delta_j}{\sqrt{\xi_j^2+\Delta_j^2}},\ i,j=\pm 1 \quad (2.53)$$

où les énergies monoparticulaires renormalisées sont données par :

$$\xi_j = (j\frac{\epsilon}{2} - gv_j^2) + \frac{g}{1-\frac{\langle \hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}}(u^2_{-j}-v^2_{-j})\big(\langle P^\dagger_jP^\dagger_{-j}\rangle + \langle P^\dagger_jP_{-j}\rangle\big) - \mu, \quad j=\pm 1 \quad (2.54)$$

Par conséquent, on voit que les équations de champ moyen généralisé ont la même structure mathématique que les équations BCS usuelles, où les énergies monoparticulaires et l'interaction sont devenues renormalisées, puis qu'elles dépendent des amplitudes RPA. Les équations de champ moyen généralisé sont dites alors "des équations BCS renormalisées".

Revenant maintenant à la question évoquée au début de cette section concernant la minimisation de $\langle H'\rangle$ par rapport à u_j et v_j. D'habitude, pour réaliser la minimisation de $\langle H'\rangle$ par rapport à u_j et v_j on écrit :

$$\frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial u_j} + \frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial v_j}\frac{\partial v_j}{\partial u_j} = 0, \quad j=\pm 1 \quad (2.55)$$

Dérivons en premier lieu l'énergie $\langle H'\rangle$ par rapport à u_j :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial u_j} &= -2g\Omega^2v_j(u_jv_j+u_{-j}v_{-j}) + \Big\{(j\epsilon-2\mu)u_j + 4g\Omega u_jv_j^2 + 2g\Omega v_ju_{-j}v_{-j}\Big\}\langle \hat{N}_{q,j}\rangle \\ &- 4g\Omega u_j^3\langle P^\dagger_jP_j\rangle - 4g\Omega u_ju^2_{-j}\langle P^\dagger_jP_{-j}\rangle + 4g\Omega u_jv_j^2\langle P^\dagger_jP^\dagger_j\rangle + 4g\Omega u_jv^2_{-j}\langle P^\dagger_jP^\dagger_{-j}\rangle \\ &- 2g\Omega u_jv_j^2\langle \hat{N}^2_{q,j}\rangle - 2g\Omega u_{-j}v_{-j}v_j\langle \hat{N}_{q,j}\hat{N}_{q,-j}\rangle, \end{aligned} \quad (2.56)$$

puis par rapport à v_j :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial v_j} &= 2(j\epsilon-2\mu)\Omega v_j - 2g\Omega(\Omega u_j^2v_j+2v_j^3) - 2g\Omega^2u_ju_{-j}v_{-j} + \Big\{-(j\epsilon-2\mu)v_j \\ &+ 4g\Omega(u_j^2v_j+\frac{v_j^3}{\Omega}) + 2g\Omega u_ju_{-j}v_{-j}\Big\}\langle \hat{N}_{q,j}\rangle - 4g\Omega v_j^3\langle P^\dagger_jP_j\rangle - 4g\Omega v_jv^2_{-j}\langle P^\dagger_jP_{-j}\rangle \\ &+ 4g\Omega u_j^2v_j\langle P^\dagger_jP^\dagger_j\rangle + 4g\Omega v_ju^2_{-j}\langle P^\dagger_jP^\dagger_{-j}\rangle - 2g\Omega u_j^2v_j\langle \hat{N}^2_{q,j}\rangle \\ &- 2g\Omega u_ju_{-j}v_{-j}\langle \hat{N}_{q,j}\hat{N}_{q,-j}\rangle. \end{aligned} \quad (2.57)$$

Tenant compte de la relation de normalisation $u_j^2+v_j^2=1$ en déduit que $\dfrac{\partial v_j}{\partial u_j} = -\dfrac{u_j}{v_j}$, par suite, on peut calculer :

$$\frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial u_j} + \frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial v_j}\frac{\partial v_j}{\partial u_j} = 0 \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned}&-2g\Omega^2v_j(u_jv_j+u_{-j}v_{-j}) + \Big\{(j\epsilon-2\mu)u_j + 4g\Omega u_jv_j^2 + 2g\Omega v_ju_{-j}v_{-j}\Big\}\langle \hat{N}_{q,j}\rangle \\ &-4g\Omega u_j^3\langle P^\dagger_jP_j\rangle - 4g\Omega u_ju^2_{-j}\langle P^\dagger_jP_{-j}\rangle + 4g\Omega u_jv_j^2\langle P^\dagger_jP^\dagger_j\rangle + 4g\Omega u_jv^2_{-j}\langle P^\dagger_jP^\dagger_{-j}\rangle \\ &-2g\Omega u_jv_j^2\langle \hat{N}^2_{q,j}\rangle - 2g\Omega u_{-j}v_{-j}v_j\langle \hat{N}_{q,j}\hat{N}_{q,-j}\rangle + \Big\{2(j\epsilon-2\mu)\Omega v_j - 2g\Omega(\Omega u_j^2v_j+2v_j^3) \\ &-2g\Omega^2u_ju_{-j}v_{-j} + \Big(-(j\epsilon-2\mu)v_j + 4g\Omega(u_j^2v_j+\tfrac{v_j^3}{\Omega}) + 2g\Omega u_ju_{-j}v_{-j}\Big)\langle \hat{N}_{q,j}\rangle \\ &-4g\Omega v_j^3\langle P^\dagger_jP_j\rangle - 4g\Omega v_jv^2_{-j}\langle P^\dagger_jP_{-j}\rangle + 4g\Omega u_j^2v_j\langle P^\dagger_jP^\dagger_j\rangle + 4g\Omega v_ju^2_{-j}\langle P^\dagger_jP^\dagger_{-j}\rangle \\ &-2g\Omega u_j^2v_j\langle \hat{N}^2_{q,j}\rangle - 2g\Omega u_ju_{-j}v_{-j}\langle \hat{N}_{q,j}\hat{N}_{q,-j}\rangle\Big\}\Big(-\frac{u_j}{v_j}\Big) = 0 \end{aligned} \quad (2.59)$$

Après simplification on obtient exactement les équations (2.46) ce qui prouve que les relations (2.43) sont des équations de type champ moyen.

Notons finalement que les paramètres de Bogoliubov eux-mêmes sont des fonctions des amplitudes RPA $X_{j,\nu}$ et $Y_{j,\nu}$.

2.4.4 Valeurs moyennes

Pour fermer le système d'équations SCQRPA et obtenir une théorie totalement self-consistante, il nous faut encore un moyen pour calculer les valeurs moyennes des opérateurs (où ce qu'on appelle fonctions de corrélations) en fonction des amplitudes RPA. Pour cela, on rappelle que, dans la phase superfluide, l'état fondamental RPA est inconnu et sa construction s'avère impossible. Néanmoins, grâce à l'inversion de l'opérateur d'excitation RPA et la définition de l'état fondamental RPA $Q_\nu|\mathrm{RPA}\rangle = 0$, ce problème est résolu d'une manière exacte. Rappelons d'abord l'inversion de l'opérateur d'excitation RPA $Q^\dagger_\nu$:

$$\begin{aligned} \bar{P}_j &= \sum_{\nu=1,2} X_{j,\nu} Q_\nu + Y_{j,\nu} Q^\dagger_\nu, \\ \bar{P}^\dagger_j &= \sum_{\nu=1,2} X_{j,\nu} Q^\dagger_\nu + Y_{j,\nu} Q_\nu. \end{aligned} \tag{2.60}$$

A titre d'exemple, nous effectuons le calcul de $\langle P^\dagger_j P_{j'}\rangle$. Nous commençons par expliciter la valeur moyenne comme suit :

$$\langle P^\dagger_j P_{j'}\rangle = \sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j'}\rangle}{\Omega}} \Big(\sum_{\nu=1,2} X_{j',\nu} \langle P^\dagger_j Q_\nu\rangle + Y_{j',\nu} \langle P^\dagger_j Q^\dagger_\nu\rangle \Big) \tag{2.61}$$

puis, en utilisant la définition de l'état RPA $Q_\nu|\mathrm{RPA}\rangle = 0$, nous pouvons remarquer que le premier terme est nul. Par conséquent, l'expression (2.61) devient :

$$\begin{aligned} \langle P^\dagger_j P_{j'}\rangle &= \sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j'}\rangle}{\Omega}} \sum_{\nu=1,2} Y_{j',\nu} \langle P^\dagger_j Q^\dagger_\nu\rangle, \\ &= \sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j'}\rangle}{\Omega}} \sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}} \sum_{\nu=1,2} Y_{j',\nu} \langle [\bar{P}^\dagger_j, Q^\dagger_\nu]\rangle. \end{aligned} \tag{2.62}$$

De plus, en remplaçant l'opérateur $Q^\dagger_\nu$ par son expression (2.29), on peut écrire :

$$\langle P^\dagger_j P_{j'}\rangle = -\sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j'}\rangle}{\Omega}} \sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}} \sum_{\nu=1,2} Y_{j',\nu} Y_{j,\nu} \langle [\bar{P}^\dagger_j, \bar{P}_j]\rangle. \tag{2.63}$$

Du fait que les opérateurs $\bar{P}^\dagger_j$ et $\bar{P}_j$ sont normalisés, on obtient ainsi l'expression désirée :

$$\langle P^\dagger_j P_{j'}\rangle = \sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j'}\rangle}{\Omega}} \sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}} \sum_{\nu=1,2} Y_{j',\nu} Y_{j,\nu}. \tag{2.64}$$

Finalement, on peut donc donner les résultats de toutes les valeurs moyennes comme suit :

$$\langle P^\dagger_j P_{j'}\rangle = \big(Y_{j,1} Y_{j',1} + Y_{j,2} Y_{j',2}\big) \sqrt{\big(1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}\big)\big(1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j'}\rangle}{\Omega}\big)},$$

$$\begin{aligned}\langle P_j P_{j'}^\dagger\rangle &= \big(X_{j,1}X_{j',1}+X_{j,2}X_{j',2}\big)\sqrt{\big(1-\frac{\langle\hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}\big)\big(1-\frac{\langle\hat{N}_{q,j'}\rangle}{\Omega}\big)},\\ \langle P_j P_{j'}\rangle &= \langle P_j^\dagger P_{j'}^\dagger\rangle = \big(X_{j,1}Y_{j',1}+X_{j,2}Y_{j',2}\big)\sqrt{\big(1-\frac{\langle\hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}\big)\big(1-\frac{\langle\hat{N}_{q,j'}\rangle}{\Omega}\big)}.\end{aligned} \tag{2.65}$$

2.5 Nombres d'occupation

La détermination des quantités $\hat{N}_{q,j}$, $\hat{N}_{q,j}^2$ et $\hat{N}_{q,j}\hat{N}_{q,j'}$ a toujours constitué un problème sérieux en SCRPA, puisqu'on ne peut pas les déterminer d'une manière systématique dans la SCQRPA, et cela, bien qu'ils soient fondamentaux pour la fermeture du système d'équations SCQRPA. Suivant la méthode de Yamamura *et al.* (SY71; Yam74; Nis76) et aussi Feucht dans la référence (Feu00), ce problème se résout d'une manière élégante. On peut exprimer ces quantités à l'aide de séries en fonction des opérateurs $P_j^\dagger$ et P_j. Tout d'abord, on va commencer par la détermination de l'opérateur nombre d'occupation des quasi-particules relatif à chaque niveau. Comme hypothèse de départ, nous développons $\hat{N}_{q,j}$ en une série de la forme suivante :

$$\hat{N}_{q,j} = \sum_{m_j=1}^{\Omega} \alpha_{m_j} {P_j^\dagger}^{m_j} P_j^{m_j},\ j=\pm 1. \tag{2.66}$$

Deux méthodes différentes pour faire ce calcul sont envisageables. La première basée sur la technique de développement bosonique, alors que la seconde utilise l'opérateur identité relatif à chaque niveau j.

2.5.1 Développement bosonique

En utilisant la représentation bosonique des opérateurs quasi-spin de notre modèle, on peut écrire :

$$\begin{aligned}\hat{N}_{q,j} &= 2B_j^\dagger B_j,\\ P_j^\dagger &= B_j^\dagger\left(1-\frac{1}{\Omega}B_j^\dagger B_j\right)^{\frac{1}{2}},\\ P_j &= (P_j^\dagger)^\dagger = \left(1-\frac{1}{\Omega}B_j^\dagger B_j\right)^{\frac{1}{2}} B_j\end{aligned} \tag{2.67}$$

où on peut montrer que dans cette représentation ces opérateurs obéissent aux règles de commutations (2.1). La transformation inverse de (2.67) nous donne :

$$\begin{aligned}B_j^\dagger &= P_j^\dagger\left(1-\frac{1}{\Omega}B_j^\dagger B_j\right)^{-\frac{1}{2}},\\ B_j &= \left(1-\frac{1}{\Omega}B_j^\dagger B_j\right)^{-\frac{1}{2}} P_j.\end{aligned} \tag{2.68}$$

Par conséquent, à l'aide de (2.68), $\hat{N}_{q,j}$ peut être exprimée comme suit :

$$\begin{aligned}\hat{N}_{q,j} &= 2B_j^\dagger B_j,\\ &= 2P_j^\dagger\left(1-\frac{1}{\Omega}B_j^\dagger B_j\right)^{-1} P_j,\\ &= 2P_j^\dagger\left(1-\frac{1}{2\Omega}\hat{N}_{q,j}\right)^{-1} P_j.\end{aligned} \tag{2.69}$$

On obtient ainsi, une relation de récurrence pour $\hat{N}_{q,j}$, qui peut être résolue par itération. On commence l'itération avec $\hat{N}^{(0)}_{q,j} = 0$ et on remplace successivement $\hat{N}_{q,j}$ dans la partie de droite de (2.69) par ce que l'on obtient dans la partie de gauche. La première itération donne :

$$\hat{N}^{(1)}_{q,j} = 2P^\dagger_j P_j. \tag{2.70}$$

Remarquons que cette relation est exacte pour $J = 1/2$. Ensuite, en remplaçant $\hat{N}^{(1)}_{q,j}$ dans la partie à droite de (2.69), on obtient :

$$\begin{aligned} \hat{N}^{(2)}_{q,j} &= 2P^\dagger_j \left(1 - \frac{1}{\Omega} P^\dagger_j P_j\right)^{-1} P_j, \\ &= 2P^\dagger_j P_j + 2P^\dagger_j \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{P^\dagger_j P_j}{\Omega}\right)^n P_j. \end{aligned} \tag{2.71}$$

En négligeant tous les termes d'ordre supérieur à ${P^\dagger_j}^2 {P_j}^2$ et en utilisant une progression géométrique, on peut transformer la somme dans (2.71) comme suit :

$$\begin{aligned} 2P^\dagger_j \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{P^\dagger_j P_j}{\Omega}\right)^n P_j &= \frac{2}{\Omega} {P^\dagger_j}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{P_j P^\dagger_j}{\Omega}\right)^n P_j^2 \\ &= \frac{2}{\Omega} {P^\dagger_j}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\Omega P^\dagger_j P_j - \hat{N}_{q,j} + \Omega}{\Omega^2}\right)^n P_j^2, \\ &\simeq \frac{2}{\Omega} {P^\dagger_j}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-\hat{N}_{q,j} + \Omega}{\Omega^2}\right)^n P_j^2, \\ &\simeq \frac{2}{\Omega} {P^\dagger_j}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\Omega}\right)^n P_j^2, \\ &\simeq \frac{2}{\Omega} {P^\dagger_j}^2 \frac{1}{1 - \frac{1}{\Omega}} P_j^2, \\ &\simeq \frac{2}{\Omega - 1} {P^\dagger_j}^2 P_j^2. \end{aligned} \tag{2.72}$$

On peut donc écrire pour $\hat{N}^{(2)}_{q,j}$:

$$\hat{N}^{(2)}_{q,j} \simeq 2P^\dagger_j P_j + \frac{2}{\Omega - 1} {P^\dagger_j}^2 P_j^2. \tag{2.73}$$

Pour continuer ce développement en gardant la même forme (2.66), cette méthode s'avère très compliquée, puiqu'il faut commuter les opérateurs $P^\dagger_j$ et P_j qui n'apparaissent pas dans le bon ordre. En arrêtant le développement à cet ordre on peut donner une expression approximée de $\hat{N}_{q,j}$, qui est exacte pour $J = 3/2$, sous la forme suivante :

$$\hat{N}_{q,j} \simeq 2P^\dagger_j P_j + \frac{2}{\Omega - 1} {P^\dagger_j}^2 P_j^2. \tag{2.74}$$

Ainsi, à l'aide de la méthode de développement bosonique, nous avons pu obtenir le développement désiré pour $\hat{N}_{q,j}$. Ayant une expression pour $\hat{N}_{q,j}$, pour obtenir $\hat{N}^2_{q,j}$ il suffit de l'élever au carré et de commuter les opérateurs $P^\dagger_{q,j}$ et $P_{q,j}$ pour avoir le bon ordre ; après calcul on obtient :

$$\hat{N}^2_{q,j} \simeq 4P^\dagger_j P_j + \frac{4(\Omega + 1)}{(\Omega - 1)} {P^\dagger_j}^2 P_j^2. \tag{2.75}$$

où j'ai négligé tous les termes d'ordre supérieur à ${P_j^\dagger}^2 {P_j}^2$ à cause de la complexité de calcul. Finalement, en utilisant le développement de $\hat{N}_{q,j}$, on peut aussi trouver une expression pour $\hat{N}_{q,j}\hat{N}_{q,j'}$, mais à cause de la complexité du calcul, on s'arrête à l'ordre le plus bas :

$$\hat{N}_{q,j}\hat{N}_{q,j'} \simeq 4P_j^\dagger P_j P_{j'}^\dagger P_{j'}. \tag{2.76}$$

2.5.2 Méthode de l'opérateur identité

Pour surmonter les difficultés rencontrées dans l'utilisation de la méthode de développement bosonique, nous présentons une autre méthode de développement qui donne le résultat cherché d'une manière systématique. Cette méthode est inspirée du développement effectué pour le modèle de Lipkin (SY71; Yam74; Nis76). Nous l'avons adapté pour le modèle de pairing à deux niveaux ainsi qu'au modèle à un niveau. Nous rappelons que, dans le modèle à deux niveaux, les opérateurs $\hat{N}_{q,j}$, $P_{q,j}^\dagger$ et $P_{q,j}$ constituent les générateurs d'une algèbre $SU(2)$ pour chacun des deux niveaux j. Par conséquent, le modèle satisfait une algèbre $SU(2) \times SU(2)$. Grâce à cette algèbre, il est facile de trouver une base orthonormée complète pour le sous-espace de Hilbert correspondant à chaque niveau j :

$$|n_j\rangle = \sqrt{\frac{\Omega^{n_j}(\Omega - n_j)!}{\Omega! n_j!}} {P_j^\dagger}^{n_j} |-\rangle,\ j = \pm 1 \tag{2.77}$$

où $n_j = 0, 1, \ldots, \Omega$. Pour trouver cette base, il suffit de connaître la relation suivante :

$$\langle - | P_j^{n_j} {P_j^\dagger}^{n_j} | - \rangle = \frac{\Omega! n_j!}{\Omega^{n_j}(\Omega - n_j)!}. \tag{2.78}$$

En utilisant cette base, on peut exprimer l'opérateur identité relatif au niveau j comme suit :

$$1_j = \sum_{n_j=0}^{\Omega} |n_j\rangle\langle n_j| = |-\rangle\langle -| + \sum_{n_j=1}^{\Omega} \frac{\Omega^{n_j}(\Omega - n_j)!}{\Omega! n_j!} {P_j^\dagger}^{n_j} |-\rangle\langle -| P_j^{n_j},\ j = \pm 1. \tag{2.79}$$

Cela nous permet d'exprimer le projecteur $|-\rangle\langle -|$:

$$|-\rangle\langle -| = 1_j - \sum_{n_j=1}^{\Omega} \frac{\Omega^{n_j}(\Omega - n_j)!}{\Omega! n_j!} {P_j^\dagger}^{n_j} |-\rangle\langle -| P_j^{n_j}. \tag{2.80}$$

On remarque que l'équation (2.80) produit un développement de la forme :

$$|-\rangle\langle -| = \sum_{m_j=0}^{\Omega} \beta_{m_j} {P_j^\dagger}^{m_j} P_j^{m_j}. \tag{2.81}$$

En insérant (2.81) à gauche et à droite dans (2.80) et en identifiant les coefficients, on obtient :

$$\beta_0 = 1,\ \ \beta_{m_j} = -\sum_{l=0}^{m_j-1} \frac{\Omega^{m_j-l}(\Omega - m_j + l)!}{\Omega!(m_j - l)!} \beta_l. \tag{2.82}$$

Explicitement, les premiers coefficients sont données comme suit :

$$\begin{aligned} \beta_0 &= 1, \\ \beta_1 &= -1, \\ \beta_2 &= \frac{\Omega - 2}{2(\Omega - 1)}, \\ \beta_3 &= -\frac{\Omega^2 - 6\Omega + 12}{6(\Omega - 1)(\Omega - 2)}. \end{aligned} \tag{2.83}$$

Cependant, pour calculer les quantités $\hat{N}_{q,j}$ et $\hat{N}^2_{q,j}$ qui sont du type $\hat{N}^k_{q,j}$, on peut utiliser un développement suivant l'hypothèse de départ sous la forme :

$$\hat{N}^k_{q,j} = \sum_{l_j=1}^{\Omega} \alpha^{(k)}_{l_j} {P_j^\dagger}^{l_j} P_j^{l_j}\,,\ j = \pm 1. \tag{2.84}$$

Pour tous les opérateurs $\hat{N}^k_{q,j}$, en utilisant le fait :

$$\hat{N}_{q,j}|n_j\rangle = 2n_j|n_j\rangle, \tag{2.85}$$

on peut calculer :

$$\begin{aligned}
\hat{N}^k_{q,j} &= \sum_{n_j=0}^{\Omega} \hat{N}^k_{q,j}|n_j\rangle\langle n_j| && (2.86a)\\
&= \sum_{n_j=0}^{\Omega} (2n_j)^k|n_j\rangle\langle n_j| && (2.86b)\\
&= \sum_{n_j=0}^{\Omega} \frac{\Omega^{n_j}(\Omega-n_j)!}{\Omega! n_j!}(2n_j)^k {P_j^\dagger}^{n_j}|-\rangle\langle -|P_j^{n_j}. && (2.86c)
\end{aligned}$$

Ensuite, insérant (2.81) dans la partie droite de (2.86c) et substituant (2.84) dans la partie gauche de (2.86c), on obtient :

$$\begin{aligned}
\hat{N}^k_{q,j} &= \sum_{n_j=0}^{\Omega} \frac{\Omega^{n_j}(\Omega-n_j)!}{\Omega! n_j!}(2n_j)^k \sum_{m_j=0}^{\Omega} \beta_{m_j} {P_j^\dagger}^{n_j} {P_j^\dagger}^{m_j} P_j^{m_j} P_j^{n_j}\\
\sum_{l_j=1}^{\Omega} \alpha^{(k)}_{l_j} {P_j^\dagger}^{l_j} P_j^{l_j} &= \sum_{n_j=1}^{\Omega} \frac{\Omega^{n_j}(\Omega-n_j)!}{\Omega! n_j!}(2n_j)^k \sum_{m_j=0}^{\Omega} \beta_{m_j} {P_j^\dagger}^{n_j+m_j} P_j^{n_j+m_j}\\
&= \sum_{l_j=1}^{\Omega}\sum_{m_j=0}^{l_j-1} \frac{\Omega^{l_j-m_j}(\Omega-l_j+m_j)!}{\Omega!(l_j-m_j)!}(2(l_j-m_j))^k \beta_{m_j} {P_j^\dagger}^{l_j} P_j^{l_j}. && (2.87)
\end{aligned}$$

Par identification, il est donc facile d'obtenir les coefficients $\alpha^{(k)}_{l_j}$ à partir de (2.87) :

$$\alpha^{(k)}_{l_j} = \sum_{m_j=0}^{l_j-1} \frac{\Omega^{l_j-m_j}(\Omega-l_j+m_j)!}{\Omega!(l_j-m_j)!}(2(l_j-m_j))^k \beta_{m_j}. \tag{2.88}$$

Ainsi, pour calculer $\hat{N}_{q,j}$, il suffit de mettre $k=1$ dans (2.84) ; on obtient alors :

$$\hat{N}_{q,j} = \sum_{l_j=1}^{\Omega} \alpha^{(1)}_{l_j} {P_j^\dagger}^{l_j} P_j^{l_j}, \tag{2.89}$$

avec :

$$\alpha^{(1)}_{l_j} = \sum_{m_j=0}^{l_j-1} \frac{\Omega^{l_j-m_j}(\Omega-l_j+m_j)!}{\Omega!(l_j-m_j)!}(2(l_j-m_j))\beta_{m_j}. \tag{2.90}$$

Les premiers coefficients $\alpha^{(1)}_{l_j}$ sont explicitement donnés comme suit :

$$\alpha^{(1)}_1 = 2,$$

$$\begin{aligned}
\alpha_2^{(1)} &= \frac{2}{\Omega-1}, \\
\alpha_3^{(1)} &= \frac{4}{(\Omega-1)(\Omega-2)}, \\
\alpha_4^{(1)} &= \frac{2(5\Omega-6)}{(\Omega-1)^2(\Omega-2)(\Omega-3)}.
\end{aligned} \tag{2.91}$$

Finalement, pour $\hat{N}_{q,j}$ on peut écrire :

$$\hat{N}_{q,j} = 2P_j^\dagger P_j + \frac{2}{\Omega-1}{P_j^\dagger}^2 P_j^2 + \frac{4}{(\Omega-1)(\Omega-2)}{P_j^\dagger}^3 P_j^3 + \frac{2(5\Omega-6)}{(\Omega-1)^2(\Omega-2)(\Omega-3)}{P_j^\dagger}^4 P_j^4 + \ldots. \tag{2.92}$$

De la même manière, il est très facile avec cette méthode de trouver un développement pour $\hat{N}_{q,j}^2$; il suffit de mettre $k=2$ dans (2.84) et d'expliciter les coefficients $\alpha_{l_j}^{(2)}$; après calcul, on obtient :

$$\hat{N}_{q,j}^2 = 4P_j^\dagger P_j + \frac{4(\Omega+1)}{\Omega-1}{P_j^\dagger}^2 P_j^2 + \frac{8(\Omega+1)}{(\Omega-1)(\Omega-2)}{P_j^\dagger}^3 P_j^3 + \frac{4(\Omega+1)(5\Omega-6)}{(\Omega-1)^2(\Omega-2)(\Omega-3)}{P_j^\dagger}^4 P_j^4 + \ldots. \tag{2.93}$$

Nous allons maintenant exprimer les nombres d'occupation de quasi-particules relativement à chaque niveau j en fonction des amplitudes RPA. On commence, par l'évaluation de la valeur moyenne de (2.72) sur le vide RPA et on peut écrire :

$$\langle \hat{N}_{q,j} \rangle \simeq 2\langle P_j^\dagger P_j \rangle + \frac{2}{\Omega-1}\langle {P_j^\dagger}^2 P_j^2 \rangle. \tag{2.94}$$

En utilisant (2.28) et (2.33), on peut exprimer $\langle {P_j^\dagger}^2 P_j^2 \rangle$ comme suit :

$$\langle {P_j^\dagger}^2 P_j^2 \rangle = K_{j,1} + K_{j,2}\langle P_j^\dagger P_j \rangle + K_{j,3}\langle P_j P_j^\dagger \rangle + K_{j,4}\langle P_j^\dagger P_j^\dagger \rangle \tag{2.95}$$

où :

$$\begin{aligned}
K_{j,1} &= (1+\frac{2}{\Omega})\Big\{ \big(X_{j,1}Y_{j,1} + X_{j,2}Y_{j,2}\big)^2 + 2\big(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2\big)^2 \Big\}, \\
K_{j,2} &= -\frac{2}{\Omega^2}\Big\{ 2\big(X_{j,1}Y_{j,1} + X_{j,2}Y_{j,2}\big)^2 + 3\big(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2\big)^2 \Big\}, \\
K_{j,3} &= -\frac{2}{\Omega^2}\Big\{ \big(X_{j,1}Y_{j,1} + X_{j,2}Y_{j,2}\big)^2 + 3\big(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2\big)^2 \Big\}, \\
K_{j,4} &= -\frac{6}{\Omega^2}\big(X_{j,1}Y_{j,1} + X_{j,2}Y_{j,2}\big)\big(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2\big).
\end{aligned} \tag{2.96}$$

Aussi, comme cela a été déjà donné dans (2.65), on a :

$$\begin{aligned}
\langle P_j^\dagger P_j \rangle &= (Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2)(1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \rangle}{\Omega}), \\
\langle P_j^\dagger P_j^\dagger \rangle &= (X_{j,1}Y_{j,1} + X_{j,2}Y_{j,2})(1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \rangle}{\Omega}), \\
\langle P_j P_j^\dagger \rangle &= (X_{j,1}^2 + X_{j,2}^2)(1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \rangle}{\Omega}).
\end{aligned} \tag{2.97}$$

On peut alors exprimer $\langle \hat{N}_{q,j} \rangle$ de la manière suivante :

$$\langle \hat{N}_{q,j} \rangle \simeq 2(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2)(1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j} \rangle}{\Omega}) + \frac{2}{(\Omega-1)}K_{j,1} + \frac{2}{(\Omega-1)}\Big\{ K_{j,2}(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2)$$

$$+ \quad K_{j,3}(X_{j,1}^2 + X_{j,2}^2) + K_{j,4}(X_{j,1}Y_{j,1} + X_{j,2}Y_{j,2})\Big\}(1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}). \tag{2.98}$$

Finalement, après réarrangement des termes, on peut obtenir l'expression de $\langle \hat{N}_{q,j}\rangle$ comme fonction des amplitudes RPA :

$$\langle \hat{N}_{q,j}\rangle \simeq \frac{N}{D} \tag{2.99}$$

$$\begin{aligned}
N &= 2(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2) + \frac{2}{(\Omega-1)}\Big\{K_{j,1} + \Omega\big(K_{j,2}(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2) + K_{j,3}(X_{j,1}^2 + X_{j,2}^2) \\
&+ K_{j,4}(X_{j,1}Y_{j,1} + X_{j,2}Y_{j,2})\big)\Big\} \\
D &= 1 + \frac{2}{\Omega}(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2) + \frac{2}{(\Omega-1)}\Big\{K_{j,2}(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2) + K_{j,3}(X_{j,1}^2 + X_{j,2}^2) \\
&+ K_{j,4}(X_{j,1}Y_{j,1} + X_{j,2}Y_{j,2})\Big\}
\end{aligned} \tag{2.100}$$

De la même manière, on exprime $\langle \hat{N}_{q,j}^2\rangle$ et $\langle \hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1}\rangle$ de la façon suivante :

$$\langle \hat{N}_{q,j}^2\rangle = 2(\Omega+1)\langle \hat{N}_{q,j}\rangle - 4\Omega(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2)(1 - \frac{\langle \hat{N}_{q,j}\rangle}{\Omega}) \tag{2.101}$$

et

$$\langle \hat{N}_{q,1}\hat{N}_{q,-1}\rangle \simeq \frac{4M}{1 - \frac{4}{\Omega^2}(Y_{1,1}^2 + Y_{1,2}^2)(Y_{-1,1}^2 + Y_{-1,2}^2)} \tag{2.102}$$

où M est une constante, dépendante des amplitudes RPA, donnée par :

$$\begin{aligned}
M &= (Y_{1,1}^2 + Y_{1,2}^2)(Y_{-1,1}^2 + Y_{-1,2}^2) + (1 + \frac{2}{\Omega})\Big\{(Y_{-1,1}X_{1,1} + Y_{-1,2}X_{1,2})(X_{-1,1}Y_{1,1} \\
&+ X_{-1,2}Y_{1,2}) + (Y_{-1,1}Y_{1,1} + Y_{-1,2}Y_{1,2})(X_{-1,1}X_{1,1} + X_{-1,2}X_{1,2})\Big\} \\
&- \frac{2}{\Omega}\Big\{(Y_{-1,1}X_{1,1} + Y_{-1,2}X_{1,2})(X_{-1,1}X_{1,1} + X_{-1,2}X_{1,2})\langle P_1^\dagger P_1^\dagger\rangle \\
&+ (Y_{-1,1}Y_{1,1} + Y_{-1,2}Y_{1,2})(X_{-1,1}Y_{1,1} + X_{-1,2}Y_{1,2})\langle P_1 P_1\rangle \\
&+ \Big\{(Y_{-1,1}X_{1,1} + Y_{-1,2}X_{1,2})(X_{-1,1}Y_{1,1} + X_{-1,2}Y_{1,2}) + (Y_{-1,1}Y_{1,1} \\
&+ Y_{-1,2}Y_{1,2})(X_{-1,1}X_{1,1} + X_{-1,2}X_{1,2})\Big\}(2\langle P_1^\dagger P_1\rangle + \langle P_1 P_1^\dagger\rangle) \\
&+ (Y_{-1,1}^2 + Y_{-1,2}^2)(X_{-1,1}Y_{1,1} + X_{-1,2}Y_{1,2})\langle P_1^\dagger P_{-1}^\dagger\rangle + (Y_{-1,1}^2 + Y_{-1,2}^2)(Y_{-1,1}Y_{1,1} \\
&+ Y_{-1,2}Y_{1,2})\langle P_1^\dagger P_{-1}\rangle + \frac{1}{2}(Y_{1,1}^2 + Y_{1,2}^2)(Y_{-1,1}^2 + Y_{-1,2}^2)(\langle \hat{N}_{q,1}\rangle + \langle \hat{N}_{q,-1}\rangle)\Big\}.
\end{aligned} \tag{2.103}$$

Avec ce dernier calcul nous sommes en mesure d'appliquer la méthode SCQRPA.

2.6 Quasi-particule RPA

Comme nous l'avons vu dans la partie précédente sur les approximations du champ moyen et au-delà, l'application de la méthode QRPA consiste à trouver la solution de champ moyen du Hamiltonien (1.1) et de résoudre les équations de la RPA standard.

2.6.1 Solution de champ moyen

La théorie BCS constitue la solution de champ moyen de l'équation (1.1). Nous commençons donc par la dérivation de la solution de champ moyen. Puisque cette dérivation est variationnelle, nous choisissons une fonction d'onde d'essai pour l'état fondamental sous la forme habituelle :

$$|\mathrm{BCS}\rangle = \prod_{j,m}(u_j + v_j a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\bar{m}})|-\rangle \tag{2.104}$$

où $|-\rangle$ est le vide nu et v_j est l'amplitude d'occupation de paires et u_j est tel que $u_j^2 + v_j^2 = 1$. Ces paramètres sont déterminés à partir de la minimisation de la valeur moyenne dans l'état d'essai du Hamiltonien quasi-particule (2.17) par rapport à v_j. Cette fonction d'onde est appropriée à un système à N particules (avec N pair). La valeur moyenne de l'opérateur nombre total de quasi-particules dans l'état $|\mathrm{BCS}\rangle$ est donnée par :

$$N = \langle \mathrm{BCS}|\hat{N}|\mathrm{BCS}\rangle = 2\Omega(v_1^2 + v_{-1}^2). \tag{2.105}$$

On peut aussi donner la valeur moyenne de son carré $\hat{N}^2$:

$$N^2 = \langle \mathrm{BCS}|\hat{N}^2|\mathrm{BCS}\rangle = 4\Omega v_1^2(u_1^2 + \Omega v_1^2) + 4\Omega v_{-1}^2(u_{-1}^2 + \Omega v_{-1}^2) + 8\Omega^2 v_1^2 v_{-1}^2. \tag{2.106}$$

Nous pouvons alors calculer la variance du nombre total de particules :

$$\begin{aligned}(\Delta N)^2 &= \langle \mathrm{BCS}|\hat{N}^2|\mathrm{BCS}\rangle - \langle \mathrm{BCS}|\hat{N}|\mathrm{BCS}\rangle^2 \\ &= 4\Omega(u_1^2 v_1^2 + u_{-1}^2 v_{-1}^2).\end{aligned} \tag{2.107}$$

La valeur moyenne du Hamiltonien contraint (2.17) dans cet état est donné par :

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{BCS}|H'|\mathrm{BCS}\rangle &= 2\Omega v_1^2(\frac{\epsilon}{2} - \mu) - 2\Omega v_{-1}^2(\frac{\epsilon}{2} + \mu) - g\Omega(\Omega u_1^2 v_1^2 + v_1^4) \\ &- g\Omega(\Omega u_{-1}^2 v_{-1}^2 + v_{-1}^4) - 2g\Omega^2 u_1 v_1 u_{-1} v_{-1}.\end{aligned} \tag{2.108}$$

Puisque l'état $|\mathrm{BCS}\rangle$ est complètement déterminé par la donnée des paramètres u_j et v_j, le problème consiste à calculer ces deux paramètres. Suivant le schéma de minimisation présenté dans la deuxième partie, la variation de la valeur moyenne de H' dans l'état BCS s'écrit :

$$\delta\langle \mathrm{BCS}|H'|\mathrm{BCS}\rangle = 0. \tag{2.109}$$

Mathématiquement l'équation (2.109) est équivalente à :

$$\left(\frac{\partial}{\partial v_j} + \frac{\partial u_j}{\partial v_j}\frac{\partial}{\partial u_j}\right)\langle \mathrm{BCS}|H'|\mathrm{BCS}\rangle = 0. \tag{2.110}$$

Après différentiation, on obtient l'ensemble des équations BCS :

$$2\xi_j u_j v_j + \Delta_j(v_j^2 - u_j^2) = 0, \qquad j = \pm 1 \tag{2.111}$$

où ξ_j est l'énergie à une particule, relative au niveau j, donnée par :

$$\xi_j = (j\frac{\epsilon}{2} - g v_j^2 - \mu). \tag{2.112}$$

Δ_j est le gap (on dit aussi "champ d'appariement" ou "champ de pairing"), il a la forme suivante :

$$\Delta_j = \Delta_{-j} = g\Omega \sum_{j=\pm 1} u_j v_j. \tag{2.113}$$

Pour fixer les valeurs de ξ_j et Δ_j, les équations (2.111) produisent deux équations quadratiques pour u_j^2 et v_j^2, ayant comme solutions :

$$\begin{aligned} u_j^2 &= \frac{1}{2}(1 \pm \frac{\xi_j}{\sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}}), \\ v_j^2 &= \frac{1}{2}(1 \pm \frac{\xi_j}{\sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}}). \end{aligned} \tag{2.114}$$

Sachant que $u_1^2 = v_{-1}^2 = 1$ et $u_{-1}^2 = v_1^2 = 0$ à la limite Hartree-Fock, on a donc :

$$\begin{aligned} u_j^2 &= \frac{1}{2}(1 + \frac{\xi_j}{\sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}}), \\ v_j^2 &= \frac{1}{2}(1 - \frac{\xi_j}{\sqrt{\xi_j^2 + \Delta_j^2}}). \end{aligned} \tag{2.115}$$

Les paramètres u_j et v_j sont alors déterminés à partir d'un principe variationnel (2.109).

2.6.2 Approximation QRPA

L'approximation QRPA consiste à supposer que les opérateurs paire de quasi-particules sont des opérateurs de Bosons, autrement dit :

$$\langle \mathrm{RPA}|[P_j, P_{j'}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle = \delta_{jj'}\left(1 - \frac{\langle \mathrm{RPA}|\hat{N}_j|\mathrm{RPA}\rangle}{\Omega}\right) \approx \delta_{jj'}\langle \mathrm{RPA}|[B_j, B_{j'}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle = \delta_{jj'}. \tag{2.116}$$

L'opérateur d'excitation RPA est le même qu'en SCQRPA ; il est alors donné par :

$$Q_\nu^\dagger = \sum_{j=\pm 1} X_{j,\nu} B_j^\dagger - Y_{j,\nu} B_j, \quad \nu = 1, 2. \tag{2.117}$$

L'état fondamental RPA est aussi définit par :

$$Q_\nu |\mathrm{RPA}\rangle = 0. \tag{2.118}$$

De plus, dans la méthode QRPA standard, la matrice RPA peut être obtenue à partir de celle déjà calculée dans la méthode SCQRPA. Pour cela, il suffit d'imposer la limite $\sum_{\nu=1,2} X_{j,\nu}^2 = 1$, $Y_{j,\nu} = 0$ pour $j = \pm 1$ et supposer nulle les valeurs moyennes des densités à un et à deux corps. Les équations QRPA sont donc données par :

$$\begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & B_{1,1} & B_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & B_{2,1} & B_{2,2} \\ -B_{1,1} & -B_{1,2} & -A_{1,1} & -A_{1,2} \\ -B_{2,1} & -B_{2,2} & -A_{2,1} & -A_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{1,\nu} \\ X_{-1,\nu} \\ Y_{1,\nu} \\ Y_{-1,\nu} \end{pmatrix} = \Omega_\nu \begin{pmatrix} X_{1,\nu} \\ X_{-1,\nu} \\ Y_{1,\nu} \\ Y_{-1,\nu} \end{pmatrix} \tag{2.119}$$

où les éléments de matrice sont exprimés en fonction des double-commutateurs comme suit :

$$\begin{aligned} A_{1,1} &= \langle [B_1, [H', B_1^\dagger]]\rangle, \; A_{1,2} = \langle [B_1, [H', B_{-1}^\dagger]]\rangle \\ A_{2,1} &= \langle [B_{-1}, [H', B_1^\dagger]]\rangle, \; A_{2,2} = \langle [B_{-1}, [H', B_{-1}^\dagger]]\rangle \\ B_{1,1} &= -\langle [B_1, [H', B_1]]\rangle, \; B_{1,2} = -\langle [B_1, [H', B_{-1}]]\rangle \\ B_{2,1} &= -\langle [B_{-1}, [H', B_1]]\rangle, \; B_{2,2} = -\langle [B_{-1}, [H', B_{-1}]]\rangle. \end{aligned} \tag{2.120}$$

avec,

$$\begin{aligned}
A_{1,1} &= (\epsilon - 2\mu)(u_1^2 - v_1^2) + 2g\Omega(2u_1^2v_1^2 + \frac{v_1^4}{\Omega}) + 4g\Omega u_1v_1u_{-1}v_{-1} \\
&- g\Omega(u_1^4 + v_1^4) - 4gu_1^2v_1^2, \\
A_{1,2} &= A_{2,1} = -g\Omega(u_1^2u_{-1}^2 + v_1^2v_{-1}^2), \\
A_{2,2} &= -(\epsilon + 2\mu)(u_{-1}^2 - v_{-1}^2) + 2g\Omega(2u_{-1}^2v_{-1}^2 + \frac{v_{-1}^4}{\Omega}) + 4g\Omega u_{-1}v_{-1}u_1v_1 \\
&- g\Omega(u_{-1}^4 + v_{-1}^4) - 4gu_{-1}^2v_{-1}^2, \\
B_{1,1} &= 2g(\Omega - 1)u_1^2v_1^2, \\
B_{1,2} &= B_{2,1} = g\Omega(u_1^2v_{-1}^2 + v_1^2u_{-1}^2), \\
B_{2,2} &= 2g(\Omega - 1)u_{-1}^2v_{-1}^2.
\end{aligned} \tag{2.121}$$

Finalement, l'énergie de l'état fondamental dans cette approximation est donnée par :

$$E_{QRPA} = E_{BCS} + E_c + \mu\langle\hat{N}\rangle \tag{2.122}$$

où E_{BCS} et E_c sont les énergies de champ moyen avec contrainte et de corrélation respectivement ; elles sont données par :

$$E_{BCS} = \langle \mathrm{BCS}|H'|\mathrm{BCS}\rangle = \langle \mathrm{BCS}|H|\mathrm{BCS}\rangle - \mu\langle\hat{N}\rangle \tag{2.123}$$

$$E_c = \frac{1}{2}\sum_i(\Omega_i - A_{i,i}) \tag{2.124}$$

2.6.3 Opérateur nombre total de particules

L'opérateur nombre total de particules dans la base déformée est donné comme dans la méthode SCQRPA par :

$$\hat{N} = \sum_j \hat{N}_j \tag{2.125}$$

avec :

$$\hat{N}_j = (u_j^2 - v_j^2)\hat{N}_{q,j} + 2\Omega v_j^2 + 2u_jv_j\sqrt{\Omega}(P_j^\dagger + P_j), \quad j = \pm 1. \tag{2.126}$$

La valeur moyenne de l'opérateur nombre de particules relatif à un niveau j, dans la méthode QRPA, est donnée par :

$$\langle\hat{N}_j\rangle = (u_j^2 - v_j^2)\langle\hat{N}_{q,j}\rangle + 2\Omega v_j^2 \tag{2.127}$$

où la valeur moyenne du nombre d'occupation des quasi-particules est donnée par :

$$\langle\hat{N}_{q,j}\rangle = 2(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2). \tag{2.128}$$

L'expression (2.128) est obtenue de la manière suivante : on effectue un développement bosonique de $\hat{N}_{q,j}$ comme dans l'expression (2.74) et on garde seulement le premier ordre :

$$\langle\hat{N}_{q,j}\rangle = 2\langle P_j^\dagger P_j\rangle. \tag{2.129}$$

Ensuite, on calcule la valeur moyenne $\langle P_j^\dagger P_j\rangle$ et on peut en déduire la valeur de $\langle\hat{N}_{q,j}\rangle$:

$$\langle\hat{N}_{q,j}\rangle = \frac{2(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2)}{(1 + \frac{2}{\Omega}(Y_{j,1}^2 + Y_{j,2}^2))}, \tag{2.130}$$

La linéarisation de cette expression par rapport à Y^2 nous donne le résultat (2.128) qui est bien connu et porte le nom de "formule de Catara" (CDS94).

Chapitre 3

Phase du fluide normal

Dans cette zone, la symétrie n'est pas brisée, et le nombre total de particules est conservé. Les opérateurs paire de particules et nombre de particules sont :

$$A_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m=1}^{\Omega} a_{jm}^\dagger a_{j\bar{m}}^\dagger \tag{3.1}$$

et

$$\hat{N}_j = \sum_{m=1}^{\Omega} (a_{jm}^\dagger a_{jm} + a_{j\bar{m}}^\dagger a_{j\bar{m}}) \tag{3.2}$$

Pour chaque niveau j, les trois opérateurs $\hat{N}_j$, $A_j^\dagger$ et A_j forment une algèbre $SU(2)$. Par conséquent, le modèle à deux niveaux conduit à une algèbre $SU(2) \times SU(2)$. Le Hamiltonien du modèle est donné par (1.1) :

$$H = \frac{\epsilon}{2} \sum_j j\hat{N}_j - g\Omega \sum_{jj'} A_j^\dagger A_{j'}, \quad j = \pm 1 \tag{3.3}$$

3.1 RPA Self-consistante

Pour ne pas briser la symétrie nombre total de particules dans cette phase de fluide normal, on doit travailler avec des opérateurs d'excitation qui ne melangent pas les particules et les trous. Nous définissons alors les opérateurs d'addition (addition) P et de retrait (removal) R de la RPA particule-particule comme :

$$P^\dagger = XA_1^\dagger - YA_{-1}^\dagger, \quad R^\dagger = -YA_1 + XA_{-1} \tag{3.4}$$

où X et Y sont les amplitudes RPA satisfaisant à la condition de normalisation $X^2 - Y^2 = 1$. Cette dernière condition rend l'inversion des opérateurs P et R immédiate :

$$A_1^\dagger = XP^\dagger + YR, \quad A_{-1}^\dagger = YP^\dagger + XR. \tag{3.5}$$

L'état fondamental RPA est défini comme étant le vide des phonons d'addition et de retrait :

$$P|\text{RPA}\rangle = R|\text{RPA}\rangle = 0 \tag{3.6}$$

L'équation SCRPA est, dans ce cas, donnée par :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_a & 0 \\ 0 & -\Omega_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \tag{3.7}$$

où A, B, C, et D sont les double-commutateurs normalisés :

$$
\begin{aligned}
A &= \frac{\langle \mathrm{RPA}|[A_1,[H,A_1^\dagger]]|\mathrm{RPA}\rangle}{\langle \mathrm{RPA}|[A_1,A_1^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle}, B = -\frac{\langle \mathrm{RPA}|[A_1,[H,A_{-1}^\dagger]]|\mathrm{RPA}\rangle}{\langle \mathrm{RPA}|[A_1,A_1^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle}, \\
C &= \frac{\langle \mathrm{RPA}|[A_{-1},[H,A_1^\dagger]]|\mathrm{RPA}\rangle}{\langle \mathrm{RPA}|[A_{-1},A_{-1}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle}, D = -\frac{\langle \mathrm{RPA}|[A_{-1},[H,A_{-1}^\dagger]]|\mathrm{RPA}\rangle}{\langle \mathrm{RPA}|[A_{-1},A_{-1}^\dagger]|\mathrm{RPA}\rangle}.
\end{aligned} \tag{3.8}
$$

En utilisant les relations (3.5) et (3.6), les valeurs moyennes des double-commutateurs dans l'état RPA peuvent être évalués. Les matrices A, B, C et D sont donc des fonctions des amplitudes RPA X, Y et des densités à un corps et à deux corps $\langle \hat{N}_1 \rangle$, $\langle \hat{N}_{-1} \rangle$, $\langle \hat{N}_1^2 \rangle$, $\langle \hat{N}^2_{-1} \rangle$ et $\langle \hat{N}_1 \hat{N}_{-1} \rangle$. Les expressions finales sont :

$$
\begin{aligned}
A &= \frac{\epsilon(1-\frac{\langle \hat{N}_1\rangle}{\Omega}) + 2g[(Y^2+XY)\langle [R,R^\dagger]\rangle] - g\Omega\left(1-\frac{2\langle \hat{N}_1\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}_1^2\rangle}{\Omega^2}\right)}{1-\frac{\langle \hat{N}_1\rangle}{\Omega}}, \\
B &= \frac{g\Omega\left(1-\frac{\langle \hat{N}_1\rangle+\langle \hat{N}_{-1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}_1\hat{N}_{-1}\rangle}{\Omega^2}\right)}{1-\frac{\langle \hat{N}_1\rangle}{\Omega}}, \\
C &= -\frac{g\Omega\left(1-\frac{\langle \hat{N}_1\rangle+\langle \hat{N}_{-1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}_1\hat{N}_{-1}\rangle}{\Omega^2}\right)}{1-\frac{\langle \hat{N}_{-1}\rangle}{\Omega}}, \\
D &= \frac{\epsilon(1-\frac{\langle \hat{N}_{-1}\rangle}{\Omega}) - 2g[(X^2+XY)\langle [R,R^\dagger]\rangle] + g\Omega\left(1-\frac{2\langle \hat{N}_{-1}\rangle}{\Omega}+\frac{\langle \hat{N}^2_{-1}\rangle}{\Omega^2}\right)}{1-\frac{\langle \hat{N}_{-1}\rangle}{\Omega}}
\end{aligned} \tag{3.9}
$$

L'expression de l'énergie de l'état fondamental dans cette phase est donnée par :

$$
E = \langle H \rangle = \frac{\epsilon}{2}(\langle \hat{N}_1 \rangle - \langle \hat{N}_{-1} \rangle) - g\Omega(X^2+Y^2+2XY)\langle [R,R^\dagger]\rangle \tag{3.10}
$$

Les valeurs moyennes des commutateurs de phonons sont données par :

$$
\begin{aligned}
\langle [R,R^\dagger]\rangle &= -(X^2+Y^2) + \frac{1}{\Omega}\left(Y^2\langle \hat{N}_1\rangle + X^2\langle \hat{N}_{-1}\rangle\right), \\
\langle [P,P^\dagger]\rangle &= (X^2+Y^2) - \frac{1}{\Omega}\left(X^2\langle \hat{N}_1\rangle + Y^2\langle \hat{N}_{-1}\rangle\right)
\end{aligned} \tag{3.11}
$$

Avec ce dernier calcul, le systeme d'équations RPA n'est pas encore complètement fermé ; il reste à calculer les valeurs moyennes des densités. Pour ce faire, nous avons deux possibilités : soit nous construisons l'état RPA, soit nous utilisons le développement en fonction des opérateurs paire de particules. Cependant, puisque nous avons déjà utilisé la méthode de développement en fonction des opérateurs paire de quasi-particules dans la phase superfluide, nous préférons maintenant utiliser létat fondamental RPA. D'ailleurs, cela nous permet d'étudier la convergence dans la méthode de développement. Par conséquent, nous allons montrer comment construire le fondamental RPA et ensuite nous allons l'utiliser pour calculer les valeurs moyennes des densités.

3.2 Calcul des valeurs moyennes des densités

3.2.1 Construction de l'état fondamental RPA

Pour construire l'état RPA, nous utilisons les opérateurs paire de particules non normalisés suivants :

$$
A_j^\dagger = \sum_{m=1}^{\Omega} a_{jm}^\dagger a_{j\bar{m}}^\dagger, \quad j = \pm 1 \tag{3.12}
$$

et

$$\hat{N}_j = \sum_{m=1}^{\Omega} (a^\dagger_{jm} a_{jm} + a^\dagger_{j\bar{m}} a_{j\bar{m}}) \tag{3.13}$$

encore appelés opérateurs de quasi-spin puisqu'ils obéissent aux règles de commutation du moment cinétique suivantes :

$$\begin{aligned} [A^\dagger_j, A_j] &= \hat{N}_j - \Omega, \\ [\hat{N}_j, A^\dagger_j] &= 2A^\dagger_j, \\ [\hat{N}_j, A_j] &= -2A_j \end{aligned} \tag{3.14}$$

Pour calculer l'état fondamental RPA, nous avons besoin d'une base orthonormée. D'abord, nous commençons par le calcul de la quantité $\langle 0|A^n_j {A^\dagger_j}^n|0\rangle$. Remarquons que :

$$\begin{aligned} A_j A^\dagger_j|0\rangle &= \Omega|0\rangle \quad , \\ A_j {A^\dagger_j}^2|0\rangle &= 2(\Omega-1)A^\dagger_j|0\rangle \quad , \\ A_j {A^\dagger_j}^3|0\rangle &= 3(\Omega-2){A^\dagger_j}^2|0\rangle \quad , \\ A_j {A^\dagger_j}^4|0\rangle &= 4(\Omega-3){A^\dagger_j}^3|0\rangle \end{aligned} \tag{3.15}$$

où $|0\rangle$ désigne le vide de particule. On peut facilement déduire la formule suivante :

$$A_j {A^\dagger_j}^n|0\rangle = n(\Omega-(n-1)){A^\dagger_j}^{(n-1)}|0\rangle \tag{3.16}$$

Par suite, on obtient :

$$A^n_j {A^\dagger_j}^n|0\rangle = \frac{\Omega! n!}{(\Omega-n)!}|0\rangle \tag{3.17}$$

$$\langle 0|A^n_j {A^\dagger_j}^n|0\rangle = \frac{\Omega! n!}{(\Omega-n)!} \tag{3.18}$$

Supposons que le niveau inférieur $j=-1$ soit rempli avec 2Ω particules, lorsque le système est sans interaction. Si on cree une paire de particules dans le niveau $j=1$, on détruit une paire de particules dans le niveau $j=-1$ simultanément, de manière à ce que le nombre total de particules reste toujours conservé. Le nombre l représente le nombre de paires de particules dans le niveau superieur. A partir de la relation (3.18) on peut écrire :

$$\langle 0|A^l_1 {A^\dagger_1}^l|0\rangle = \frac{\Omega! l!}{(\Omega-l)!} \tag{3.19}$$

et

$$\langle 0|A^{\Omega-l}_{-1} {A^\dagger_{-1}}^{\Omega-l}|0\rangle = \frac{\Omega!(\Omega-l)!}{l!}, \tag{3.20}$$

d'où :

$$\langle 0|A^l_1 A^{\Omega-l}_{-1} (A^\dagger_1)^l {A^\dagger_{-1}}^{\Omega-l}|0\rangle = \Omega!^2. \tag{3.21}$$

On peut former une base orthonormée en posant :

$$|l\rangle = \frac{1}{\Omega!}(A^\dagger_1)^l {A^\dagger_{-1}}^{\Omega-l}|0\rangle \tag{3.22}$$

Dans cette base orthonormée, nous développons l'état fondamental RPA :

$$|\mathrm{RPA}\rangle = \sum_{l=0}^{\Omega} \beta_l |l\rangle \tag{3.23}$$

et à l'aide de l'une des relations (3.6) qui définissent l'état RPA :

$$(XA_1 - YA_{-1})|\mathrm{RPA}\rangle = 0, \tag{3.24}$$

nous obtenons une relation de récurrence déterminant les coefficients du développement, β_l :

$$\begin{aligned} \beta_l &= (\frac{Y}{X})\beta_{l-1}; \quad l = 1, \ldots, \Omega \\ \beta_0 &= 1, \end{aligned} \tag{3.25}$$

ce qui est équivalent à :

$$\beta_l = (\frac{Y}{X})^l; \quad l = 0, \ldots, \Omega. \tag{3.26}$$

L'état fondamental RPA non normalisé est donc donné par :

$$|\mathrm{RPA}\rangle = \sum_{l=0}^{\Omega} \left(\frac{Y}{X}\right)^l (A_1^\dagger)^l (A_{-1}^\dagger)^{\Omega-l}|0\rangle \tag{3.27}$$

La norme de l'état RPA est facilement calculée :

$$\mathcal{N}^2 = \langle \mathrm{RPA}|\mathrm{RPA}\rangle = (\Omega!)^2 \sum_{l=0}^{\Omega} \left(\frac{Y}{X}\right)^{2l} \tag{3.28}$$

Finalement, l'état fondamental RPA normalisé est :

$$|\mathrm{RPA}\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{l=0}^{\Omega} \left(\frac{Y}{X}\right)^l (A_1^\dagger)^l (A_{-1}^\dagger)^{\Omega-l}|0\rangle \tag{3.29}$$

Nous sommes maintenant capables de calculer les valeurs moyennes des densités dans l'état fondamental RPA.

3.2.2 Calcul des valeurs moyennes des densités

Dans l'état fondamental RPA, les valeurs moyennes des densités sont facilement calculées, c'est pourquoi nous donnons simplement les résultats :

$$\langle \hat{N}_1 \rangle = \frac{\sum_{l=0}^{\Omega} 2l(\frac{Y}{X})^{2l}}{\sum_{l=0}^{\Omega}(\frac{Y}{X})^{2l}} \tag{3.30}$$

$$\langle \hat{N}_1^2 \rangle = \frac{\sum_{l=0}^{\Omega} 4l^2(\frac{Y}{X})^{2l}}{\sum_{l=0}^{\Omega}(\frac{Y}{X})^{2l}} \tag{3.31}$$

$$\langle \hat{N}_{-1} \rangle = \frac{\sum_{l=0}^{\Omega} 2(\Omega-l)(\frac{Y}{X})^{2l}}{\sum_{l=0}^{\Omega}(\frac{Y}{X})^{2l}} \tag{3.32}$$

$$\langle \hat{N}_{-1}^2 \rangle = \frac{\sum_{l=0}^{\Omega} 4(\Omega-l)^2(\frac{Y}{X})^{2l}}{\sum_{l=0}^{\Omega}(\frac{Y}{X})^{2l}} \tag{3.33}$$

$$\langle \hat{N}_1\hat{N}_{-1} \rangle = \frac{\sum_{l=0}^{\Omega} 4l(\Omega-l)(\frac{Y}{X})^{2l}}{\sum_{l=0}^{\Omega}(\frac{Y}{X})^{2l}} \tag{3.34}$$

3.3 RPA standard

Quand la valeur de la force de couplage des paires g est inférieure à la valeur critique $g_c = \epsilon/(2\Omega - 1)$, dans la théorie BCS, le système est dans la phase du fluide normal. La méthode RPA dans la phase du fluide normal (pp-RPA) décrit les vibrations de paires de particules. Les équations pp-RPA peuvent être obtenues à partir des équations QRPA dans la limite $u_1^2 = v_{-1}^2 = 1$ et $v_1^2 = u_{-1}^2 = 0$. Le potentiel chimique μ n'a pas une valeur fixe entre les deux couches (il peut être placé n'importe où entre les deux niveaux). Cependant, il faut noter que les vibrations de paires décrivent l'état fondamental des systèmes $N \pm 2$ particules, et le rôle du potentiel chimique est donc juste de déplacer les énergies par la quantité $\pm 2\mu$. Les équations pp-RPA sont données par :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_a & 0 \\ 0 & -\Omega_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \tag{3.35}$$

avec, $A = \epsilon - g\Omega, B = -g\Omega$ et $C = \epsilon - g(\Omega - 2)$. Les énergies d'excitation d'addition et de retrait sont donc données par :

$$\begin{aligned} \Omega_a &= -g + \sqrt{g+\epsilon}\sqrt{\epsilon + g(1-2\Omega)} \\ \Omega_r &= g + \sqrt{g+\epsilon}\sqrt{\epsilon + g(1-2\Omega)}. \end{aligned} \tag{3.36}$$

L'énergie de champ moyen est alors évaluée comme $E_{HF} = -(\epsilon+g)\Omega$; pour l'énergie de corrélation nous utilisons l'expression :

$$\begin{aligned} E_c &= \frac{1}{2}\sum_i (\Omega_i - A_{i,i}) \\ &= \frac{1}{2}(\Omega_a - A + \Omega_r - C) \\ &= \sqrt{g+\epsilon}\sqrt{\epsilon + g(1-2\Omega)} - (\epsilon - g\Omega + g). \end{aligned} \tag{3.37}$$

Par suite, l'énergie de l'état fondamental est :

$$E_{RPA} = E_{HF} + E_c. \tag{3.38}$$

Enfin, nous devons signaler que nous pouvons retrouver les résultats de la RPA standard, en remplaçant l'état RPA corrélé utilisé dans la SCRPA (Eq. (3.29)) par l'état non corrélé avec 2Ω particules dans la couche inférieure. Dans ce cas on a $X = 1$, $Y = 0$ et les densités à un corps et à deux corps sont :

$$\langle \hat{N}_{-1} \rangle = 2\Omega, \quad \langle \hat{N}_{-1}^2 \rangle = 4\Omega^2, \quad \langle \hat{N}_1 \rangle = \langle \hat{N}_1^2 \rangle = \langle \hat{N}_1 \hat{N}_{-1} \rangle = 0 \tag{3.39}$$

En insérant (3.39) dans (3.7), on retrouve l'équation RPA standard.

Chapitre 4

Résultats numériques

Nous arrivons maintenant à la partie la plus laborieuse de notre travail dans ce modèle. Dans cette partie, nous exposons l'essentiel de nos résultats dans le modèle de pairing à deux niveaux, ainsi que la façon dont nous avons procédé pour résoudre le système d'équations RPA.

4.1 Méthode de résolution numérique

Pour réaliser le calcul numérique, nous avons écrit cinq programmes en Fortran 77. Un premier programme calcule le résultat exact, deux autres le résultat RPA self-consistante (l'un dans la zone normale et l'autre dans la zone superfluide), et deux pour le calcul (BCS et QRPA) également dans les deux zones. Tous ces programmes fournissent les énergies fondamentales, les énergies d'excitation, les potentiels chimiques exacts ainsi que ceux en QRPA et SCQRPA.

Le calcul exact est assez simple à effectuer (un appel à un sous-programme de diagonalisation d'une matrice tridiagonale symétrique est suffisant). Pour le calcul QRPA, la tâche est presque identique car il suffit de diagonaliser la matrice RPA.

Pour le calcul SCQRPA ou SCRPA, la tâche est plus délicate étant donné que nous sommes face à un système d'équations non linéaires. Pour ce faire, nous avons procédé de la manière suivante : d'abord diagonaliser la matrice RPA, puis ordonner les valeurs propres et les vecteurs propres correspondants, puis normaliser les vecteurs propres (et vérifier les relations de fermeture), puis injecter les vecteurs propres au début pour commencer une autre itération et ainsi de suite jusqu'à la convergence. Loin de la zone de transition, tout marche bien ; en se rapprochant de la zone de transition nous avons remarqué qu'il y a des instabilités numériques. Pour surmonter cette difficulté, nous avons utilisé ce qu'on appelle le freinage des itérations où on mélange les résultats des itérations n et $n-1$. De cette manière nous avons pu obtenir les résultats dans la zone de transition.

Dans ce qui suit, nous allons présenter et discuter nos résultats dans les deux phases du modèle. Tout d'abord, nous discutons nos résultats obtenus par la méthode SCRPA. Ensuite, nous les comparons avec les résultats obtenus dans d'autres travaux.

4.2 Discussion des résultats

Tout d'abord, on rappelle que dans la méthode BCS, la transition de phase pour ce modèle se produit au point correspondant à la valeur critique de la constante de couplage $g_c = \dfrac{\epsilon}{2\Omega - 1}$, où ϵ est l'énergie à une particule (elle représente l'écart entre les deux niveaux) et Ω est la moitié de la dégénérescence de chaque niveau. Dans tout ce qui suit, les figures vont être tracées en fonction de la variable :

$$V = \frac{g\Omega}{2\epsilon}.$$

D'habitude, dans ce modèle, toutes les énergies qui vont être présentées sont divisées par la quantité 2ϵ. De plus, afin de comparer nos résultats avec ceux obtenus avec d'autres méthodes données dans la littérature, nous considérons le cas où les deux couches du modèle possèdent le même spin $J = \frac{11}{2}$, c'est-à-dire $\Omega = 6$; l'énergie à une particule est $\epsilon = 2$ (en unité arbitraire). Enfin, nous allons étudier le système avec divers remplissages, ce qui clarifie la physique du modèle.

Commençons la discussion par un cas très particulier dans le modèle, à savoir le cas dit symétrique (il porte aussi le nom de cas à mi-remplissage) où le nombre de particules est $N = 12$ (en l'absence de corrélations, le niveau inférieur $j = -1$ est rempli et le niveau supérieur est vide). La particularité de ce cas provient du fait que lorsque l'on fait varier le couplage, le système présente une transition de phase du fluide normal au superfluide. Ainsi, ce cas permet d'étudier les deux phases du modèle. Par contre, dans toutes les autres configurations "hors mi-remplissage" (ou bien cas non symétriques) qui seront traitées après, le modèle demeure toujours dans la phase superfluide quelque soit la valeur de la constante de couplage.

Dans la phase du fluide normal caractérisée par $V \leqslant V_c$ (la symétrie n'est pas brisée), on doit utiliser la version $(p-p)$ des méthodes SCQRPA, QRPA et BCS, c'est-à-dire ppSCRPA, ppRPA et HF. Par ailleurs, on rappelle que les équations relatives aux méthodes ppSCRPA et ppRPA s'obtiennent en utilisant deux types de phonons (d'addition et de retrait). Contrairement à la phRPA, le problème aux valeurs propres relatif à chaque phonon (d'addition ou de retrait) donne comme valeurs propres les deux énergies d'excitation relatives aux deux phonons simultanément. Par exemple, pour le cas du phonon d'addition, la résolution des équations RPA donne l'énergie d'excitation relative au mode d'addition et au lieu de donner son opposé, elle donne l'opposé de l'énergie d'excitation du mode de retrait. En ce qui concerne l'interprétation physique de ces énergies d'excitation, on montre qu'elles sont liées aux potentiels chimiques $\mu^{\pm} = \pm\frac{1}{2}(E_0^{N\pm2} - E_0^N)$. Pour établir ce résultat, on suppose que l'état fondamental du système est donné par l'état normalisé $|N,0\rangle$ (cet état peut être l'état RPA dans le cas de la méthode ppSCRPA ou bien HF dans le cas ppRPA), puis on utilise la définition des valeurs propres RPA. Considérons le cas du mode d'addition $P^\dagger$. On peut écrire la définition de la valeur propre correspondante comme suit :

$$\Omega_a = \langle 0,N|[P,[H,P^\dagger]]|N,0\rangle. \tag{4.1}$$

Sachant que le rôle du phonon d'addition est juste de déplacer une paire de particules du niveau $j = -1$ vers le niveau $j = 1$ et tenant compte de la définition du vide $P|N,0\rangle = 0$, on obtient la série d'égalités :

$$\begin{aligned}
\Omega_a &= \langle 0,N|P(HP^\dagger - P^\dagger H)|N,0\rangle \\
&= \langle 0,N|PH|N+2,0\rangle - \langle 0,N|PP^\dagger E_0^N|N,0\rangle \\
&= E_0^{N+2}\langle 0,N|P|N+2,0\rangle - E_0^N\langle 0,N|P|N+2,0\rangle \\
&= \langle 0,N|(E_0^{N+2} - E_0^N)|N,0\rangle \\
&= 2\mu^+.
\end{aligned} \tag{4.2}$$

La valeur propre relative au phonon d'addition doit donc être identifiée avec deux fois le potentiel chimique $E_0^{N+2} - E_0^N$. En suivant la même démarche (le rôle du phonon de retrait est de déplacer une paire de particules du niveau $j = 1$ vers le niveau $j = -1$) et tenant compte de la définition du vide $R|N,0\rangle = 0$, on écrit :

$$\begin{aligned}
\Omega_r &= \langle 0,N|[R,[H,R^\dagger]]|N,0\rangle \\
&= \langle 0,N|R(HR^\dagger - R^\dagger H)|N,0\rangle \\
&= \langle 0,N|RH|N-2,0\rangle - \langle 0,N|RR^\dagger E_0^N|N,0\rangle \\
&= E_0^{N-2}\langle 0,N|R|N-2,0\rangle - E_0^N\langle 0,N|R|N-2,0\rangle \\
&= \langle 0,N|(E_0^{N-2} - E_0^N)|N,0\rangle \\
&= -2\mu^-.
\end{aligned} \tag{4.3}$$

On peut aussi conclure que la valeur propre relative au phonon de retrait doit être identifiée avec l'opposé de deux fois le potentiel chimique : $E_0^{N-2} - E_0^N$. Les valeurs propres obtenues par la

méthode HF ne seront pas présentées, parce qu'elles sont mauvaises. Par ailleurs, on peut rappeler le résultat de la diagonalisation de la matrice RPA dans le cas de la ppRPA :

$$\Omega_a = 2\mu^+ = -g + \sqrt{g+\epsilon}\sqrt{\epsilon + g(1-2\Omega)}, \quad (4.4a)$$

$$\Omega_r = -2\mu^- = g + \sqrt{g+\epsilon}\sqrt{\epsilon + g(1-2\Omega)}, \quad (4.4b)$$

Après la transition de phase qui se produit à $V_c = \dfrac{\Omega}{2(2\Omega-1)} \simeq 0.2727$ (dans le calcul BCS), la formulation $(p-p)$ ne marche plus et l'utilisation des versions quasi-particule devient impérative. On doit utiliser les méthodes SCQRPA, QRPA et BCS. De plus, dans cette phase, puisque la symétrie nombre total de particules est brisée, l'utilisation du Hamiltonien avec contrainte en représentation des quasi-particules devient indispensable.

Nous présentons maintenant les résultats QRPA. Il est bien connu que la méthode QRPA produit un mode de Goldstone (mode d'énergie nulle) qui correspond à la rotation dans l'espace de jauge et la seconde valeur propre correspond à la vibration β ("β vibration") des noyaux avec N particules. Cependant, on remarque que le mode de Goldstone constitue l'extension du mode relatif au phonon d'addition alors que le second mode est l'extension du mode de retrait. A la transition de phase, on remarque aussi que, lorsque la dégénérescence de paires $\Omega \to \infty$, l'énergie d'excitation ppRPA relative au mode de retrait Ω_r devient nulle. De plus, l'énergie d'excitation relative au mode d'addition Ω_a devient négative. La méthode ppRPA s'effondre donc à V_c ; on dit aussi qu'elle "collapse" à la transition de phase.

Le cas du mode spurieux dans la méthode SCQRPA sera traité en détail plus tard. Nous abordons maintenant la discussion de nos résultats sur l'énergie du premier état excité (énerge du premier état excité 0^+) et de l'énergie de l'état fondamental dans la configuration symétrique. Dans la figure (4.1), on montre sur la courbe du haut l'énergie d'excitation du premier état excité et, sur celle du bas, l'énergie fondamentale, toutes deux en fonction de la variable V. Nous remarquons que dans la phase de fluide normal la méthode ppSCRPA améliore nettement le résultat de l'énergie d'excitation et qu'elle s'étend pour aller loin au delà de la zone de transition prévue par la méthode BCS. *A contrario*, dans la méthode ppRPA, on constate que, à partir de la valeur $V \simeq 0.12$, le résultat commence à s'écarter du résultat exact. Après la transition de phase, on remarque que l'énergie d'excitation Ω_2 obtenue avec la méthode SCQRPA s'identifie aussi avec la vibration β (c'est-à-dire à l'énergie d'excitation du système à N particules) comme celle de la méthode QRPA. Cependant, on peut noter que l'amélioration par rapport au calcul QRPA n'est pas très importante. Cela peut être du au fait que dans la méthode QRPA, lorsqu'on effectue la transformation de Bogoliubov, on tient compte de corrélations supplémentaires par rapport à la méthode RPA. Ainsi, dans la région superfluide, la différence entre les résultats de la méthode QRPA et ceux obtenus avec la méthode SCQRPA et le calcul exact, devient moins importante que celle constatée dans la région du fluide normal. De plus, nous voyons qu'il y a une discontinuité lorque l'on passe de la ppSCRPA à la SCQRPA tandis que la ppRPA et la QRPA présentent une certaine continuité. Cela n'est pas choquant ; en effet, lorsque le système est dans la phase normale, il peut être excité soit vers un état à $N+2$ particules soit vers un état à $N-2$ particules (ces états ne peuvent pas se mélanger), par contre dans la phase superfluide l'état excité SCQRPA peut être un mélange de tous les états à $N \pm 2$ et N particules. Par ailleurs, cela explique la transition de phase brutale qui se produit. Loin de la transition de phase, on constate que notre méthode suit le résultat exact et apporte une amélioration nette à l'énergie du premier état excité par rapport à la méthode QRPA.

Venons en à l'énergie du fondamental (bas de la figure (4.1)). Nous n'avons pas représenté les résultats de la méthode QRPA (et ppRPA) parce qu'ils nécessitent une discussion séparée. Par contre, on envisage maintenant la comparaison avec les résultats des méthodes de champ moyen standard (HF+BCS) que nous avons ignorées dans la discussion des résultats concernant le mode excité. Nous remarquons que notre méthode améliore nettement le résultat de l'énergie fondamentale en comparaison avec la méthode BCS (et HF). Dans la phase normale l'énergie fondamentale ppRPA coïncide parfaitement avec le résultat exact, alors que le résultat de la méthode HF commence à s'écarter du résultat exact à partir de la valeur $V \simeq 0.12$ (cet écart

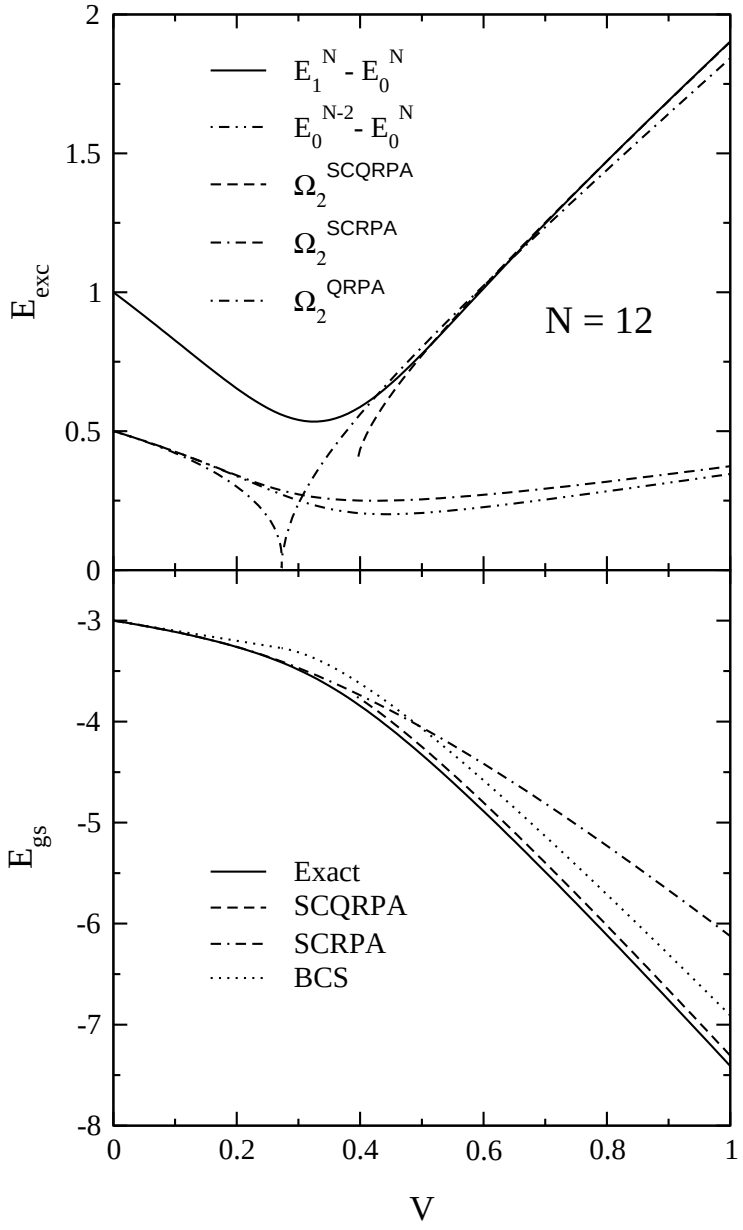

FIG. 4.1 – Energie fondamentale E_{gs} et énergie du premier état excité 0^+ E_{exc} en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 12$ (les énergies sont divisées par 2ϵ). Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$. On note que les solutions ppSCRPA et SCQRPA coexistent dans une large gamme des valeurs de V.

augmente en fonction de la constante de couplage). On remarque aussi que l'énergie fondamentale calculée par la méthode ppSCRPA s'écarte du résultat exact dès qu'on s'eloigne de la région de transition, bien que la méthode ppSCRPA puisse s'étendre à la phase superfluide. De plus, on constate que l'écart avec le résultat exact augmente fortement en fonction de la force du couplage, ce qui justifie notre choix d'identification du mode Ω_2 dans la zone superfluide. En effet, bien que

dans la région superfluide l'énergie du mode de retrait suive grossièrement le résultat du calcul exact, l'énergie fondamentale s'eloigne significativement, alors que le résultat SCQRPA dans son domaine d'application suit correctement le résultat exact pour les deux quantités étudiées. Le raccordement se fait d'une manière discontinue entre la région normale et superfluide ; cela justifie ce que nous avons mentionné et on rappelle que, à la transition de phase, les propriétés physiques du système changent.

Afin de discuter le cas de l'énergie fondamentale QRPA (et ppRPA), considérons la figure (4.2), qui montre un agrandissement des résultats des différentes méthodes utilisées dans la région de transition. Dans la phase normale on remarque que l'énergie fondamentale calculée par la méthode ppRPA suit, mais par valeur inférieure, le résultat exact. Au voisinage de la transition de phase, le résultat de la ppRPA diverge fortement et brise le principe variationnel (ce résultat est bien connu et se reproduit toujours à la transition de phase). On dit que le résultat de la RPA "collapse". Ceci se produit aussi pour le mode d'addition de la ppRPA de l'équation (4.4) : à la transition de phase, l'énergie d'excitation relative au mode d'addition devient négative. Dans la région superfluide et loin de la transition on remarque que l'énergie fondamentale de la QRPA se situe en dessus de l'énergie exacte et elle en est plus proche que celle de la SCQRPA. Ceci est un résultat paradoxal qui se répète systématiquement dans toutes les autres configurations. Apparemment, le "très bon accord" est un artéfact de la méthode QRPA qui a été déjà rencontré dans d'autres cas (BSC$^+$01). La méthode SCQRPA est une théorie bien définie résultant d'un principe variationnel pour les fonctions de corrélations à deux corps. On peut aussi la considérer comme une approche HFB pour les opérateurs de paires de fermions. Le principe de Pauli est respecté de façon optimale, puisqu'on n'utilise pas la bosonisation des opérateurs de paires de fermions et il est seulement violé dans la troncation des développements des nombres d'occupation (2.74), (2.75) et (2.76) qui sont des séries rapidement convergentes. Cependant, n'importe qu'elle approximation à la version complète de la méthode SCQRPA va certainement entrer en conflit avec le principe de Pauli, entraînant ainsi une surestimation des corrélations.

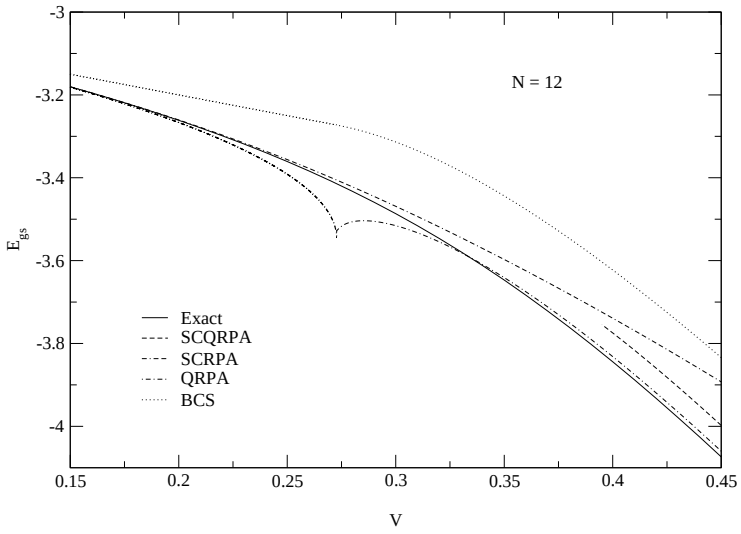

FIG. 4.2 – Agrandissement de la courbe de l'énergie fondamentale E_{gs} (voir bas de la figure (4.1)).

Dans le cas de ce modèle, l'énergie fondamentale SCQRPA est systématiquement en dessus de la valeur exacte. Cependant, le fait que l'énergie fondamentale QRPA soit plus proche de l'énergie exacte que l'énergie fondamentale SCQRPA peut être accidentel. Cela peut être lié au fait que, en passant de la SCQRPA à la QRPA, le gain en énergie correspondant à la violation du principe

de Pauli est égal, accidentellement, à la valeur nécessaire pour que l'énergie fondamentale QRPA coïncide, pratiquement, avec la valeur exacte sur une large gamme de paramètres. Nous avons effectué le calcul pour différentes types de configurations autres que la configuration symétrique de ce modèle et, systématiquement, on obtient le même résultat. Nous ne discuterons pas cette question pour les autres. Nous devons de nouveau mentionner que nous avons trouvé de telles coïncidences fortuites dans d'autres travaux (BSC$^+$01). Cependant, dans des cas plus réalistes on constate d'habitude que la méthode QRPA surlie fortement par rapport aux valeurs exactes (GB96).

La comparaison des résultats de la méthode SCQRPA avec les résultats des méthodes de champ moyen (HF et BCS) pour l'énergie d'excitation n'est pas présentée puisque notre méthode est bien meilleure que la méthode de champ moyen. Cependant, les résultats pour l'énergie fondamentale sont représentés. Bien que la méthode de champ moyen respecte le principe variationnel, l'énergie fondamentale SCQRPA est meilleure que celle de champ moyen. L'amélioration par rapport à la méthode de champ moyen de notre méthode est très importante.

Considérons maintenant les cas non symétriques : ce sont les configurations où l'un ou l'autre des deux niveaux est partiellement rempli. Dans ce type de configurations, comme dans le modèle de la séniorité, le modèle demeure toujours dans la phase superfluide indépendamment de V. Sur la figure (4.3) on représente les résultats dans le cas de la configuration $N = 8$, avec toujours $J = 11/2$ et $\epsilon = 2$: le niveau $j = -1$ est partiellement rempli lorsque $V = 0$. Sur la courbe du haut on représente les résultats de la méthode SCQRPA, QRPA et exact pour l'énergie d'excitation du premier état excité. On voit qu'il y a une nette amélioration du résultat SCQRPA par rapport au résultat QRPA. Cela est similaire au résultat déjà montré sur la figure (4.1) dans la région superfluide. Pour l'énergie fondamentale, on remarque une importante amélioration de la méthode SCQRPA par rapport à la théorie BCS. Nous avons aussi considéré d'autres configurations non symétriques pour confirmer nos conclusions, le résultat est qualitativement le même. Les configurations considérées sont relatives à des nombres de particules $N = 4$ et $N = 14$ et bien sûr pour $J = 11/2$; elles sont données respectivement dans les figures (4.4) et (4.5).

Revenons maintenant au cas du mode spurieux en SCQRPA (mode de basse énergie), c'est-à-dire ce que l'on appelle mode de Goldstone dans la méthode QRPA. Il est bien connu que la méthode QRPA produit systématiquement un mode de Goldstone, ce qui prouve que la symétrie est brisée dans la QRPA bien que le système soit fini. Ainsi, la méthode QRPA simule la situation d'un système infini. Pour voir ce que donne la méthode SCQRPA, nous considérons par exemple la configuration $J = 11/2$ et $N = 10$ (on choisit des configurations différentes pour avoir plus d'informations sur le modèle et aussi pour montrer qu'on peut réaliser le calcul SCQRPA pour n'importe quelle configuration, ce qui montre la souplesse de notre méthode). On remarque (voir figure (4.6)) que la valeur propre Ω_1 de la SCQRPA suit étroitement la quantité $E_0^{N+2} + E_0^{N-2} - 2E_0^N$, qui est la différence entre les deux potentiels chimiques $2\mu^+ = E_0^{N+2} - E_0^N$ et $2\mu^- = E_0^N - E_0^{N-2}$ obtenus dans le calcul exact. Cela permet donc d'identifier la valeur propre SCQRPA. Cette identification possède un sens physique. En effet, puisque le système est dans la phase superfluide (phase où la symétrie est brisée) alors la méthode SCQRPA ne distingue pas entre les états à $N \pm 2$. Pour les grandes valeurs de N (système infini), les quantités $2\mu^+$ et $2\mu^-$ tendent individuellement vers les modes de Goldstone. Par contre, pour les faibles valeurs de N, il est raisonnable de définir la différence entre $2\mu^+$ et $2\mu^-$ comme étant l'énergie d'excitation basse. Dans toutes les figures concernant ce mode on compare les résultats de la SCQRPA avec la combinaison $2(\mu^+ - \mu^-)$. Pour confirmer ce résultat, on choisit une autre configuration, par exemple, $J = 11/2$ et $N = 4$ correspondant à la figure (4.7). De nouveau il est clair que la valeur propre Ω_1 de la méthode SCQRPA s'identifie correctement à la combinaison $2(\mu^+ - \mu^-)$. En fait, nous trouvons des scénarios analogues pour toutes les configurations que nous avons étudiées, sauf dans le cas symétrique qui présente une légère différence. Cette configuration est représentée dans la figure (4.8). Cette différence provient du fait que, dans le cas symétrique, nous avons une transition du régime normal au superfluide qui est absente dans les autres cas partiellement remplis. Nous remarquons aussi que les valeurs $2\mu^+$ et $2\mu^-$ sont trop asymétriques, et c'est la quantité $2\mu^+$ qui joue le rôle du mode de Goldstone. En outre, l'accord de la solution Ω_1 de la méthode SCQRPA est légèrement moins bon que dans tous autres cas.

Pourquoi dans la méthode SCQRPA, contrairement à la méthode QRPA, n'avons nous pas un

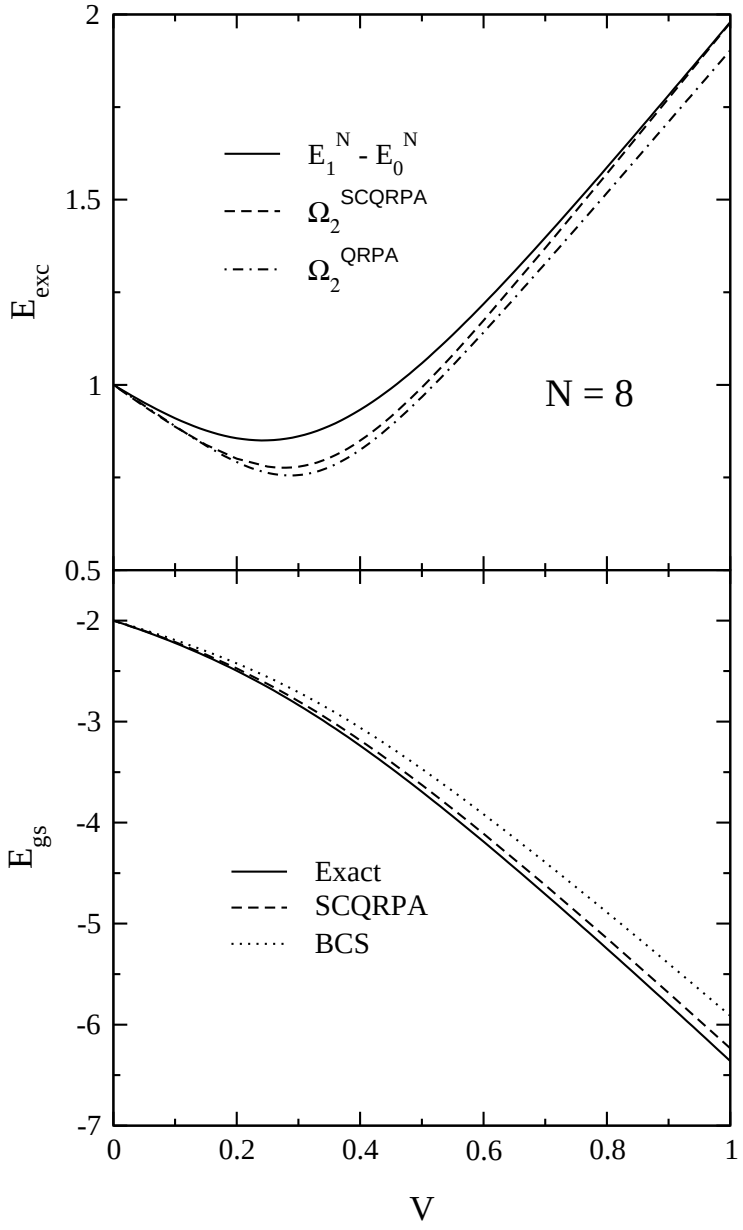

FIG. 4.3 – Même quantités que la figure (4.1), pour $N = 8$.

mode de Goldstone ? Ceci est en fait étroitement lié à la brisure spontanée de la symétrie nombre total de particules. Rappelons d'abord l'expression de cet opérateur dans la représentation des quasi-particules, il est donné par :

$$\hat{N} = \sum_{j=\pm 1} \hat{N}_j \tag{4.5}$$

avec :

$$\hat{N}_j = (u_j^2 - v_j^2)\hat{N}_{q,j} + 2\Omega v_j^2 + 2u_j v_j \sqrt{\Omega}(P_j^\dagger + P_j), \quad j = \pm 1. \tag{4.6}$$

Dans la méthode QRPA on peut vérifier que, si les termes de types $\alpha^\dagger \alpha$ étaient inclus dans

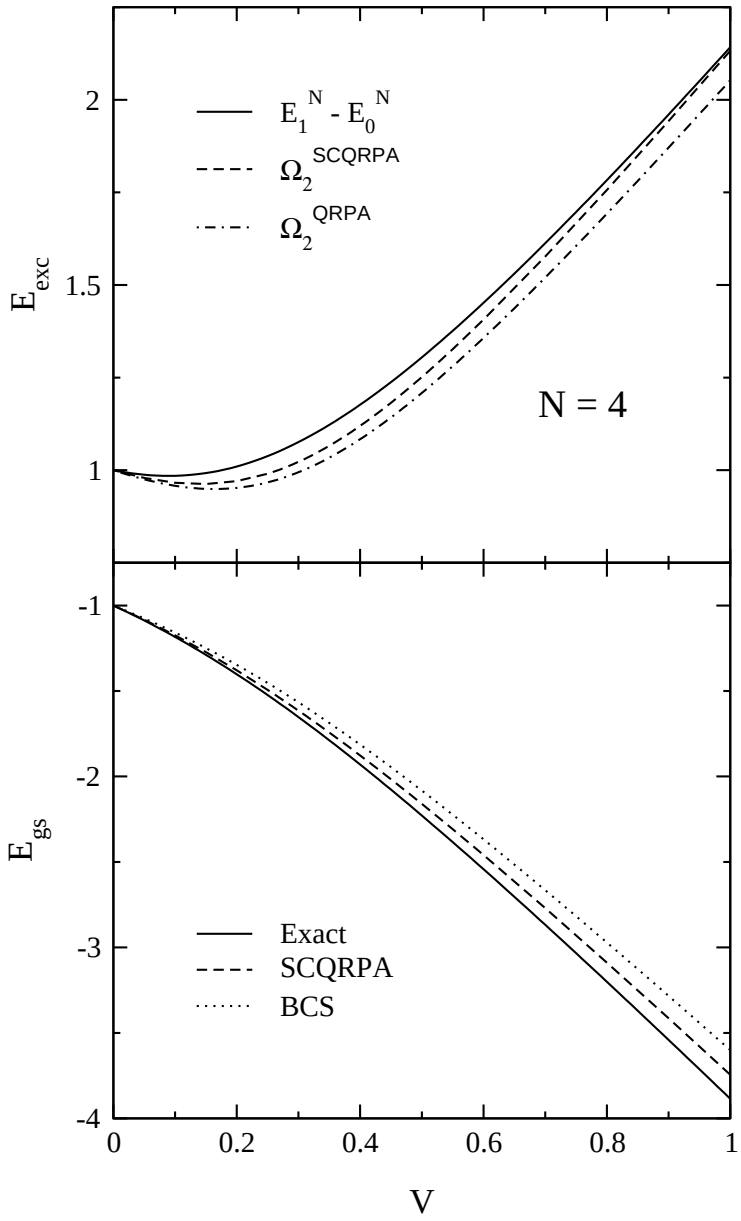

FIG. 4.4 – Même quantités que la figure (4.1), pour $N = 4$.

l'opérateur d'excitation RPA, ils découpleraient complètement des équations de la QRPA. Ainsi dans la QRPA, tout se passe comme si l'opérateur nombre total de particules était contenu dans l'opérateur d'excitation ; par suite, une solution particulière des équations QRPA est $Q^\dagger = \hat{N}$ avec $[H, \hat{N}] = 0$, ce qui donne automatiquement un mode de Goldstone. Cet argument n'est plus vrai dans la méthode SCQRPA où les termes $\hat{N}_{q,j}$ de l'opérateur du nombre total de particules contribuent, en principe, à la SCQRPA. Cependant, puisque ce sont des termes hermitiques, on ne peut pas les inclure dans l'opérateur d'excitation. Donc, la solution $Q^\dagger = \hat{N}$ n'est vraie que dans la méthode QRPA, mais plus dans la SCQRPA. Il y a cependant un avantage ; nous voyons sur les figures précédentes que nous avons pu identifié la valeur finie de Ω_1 avec une fréquence

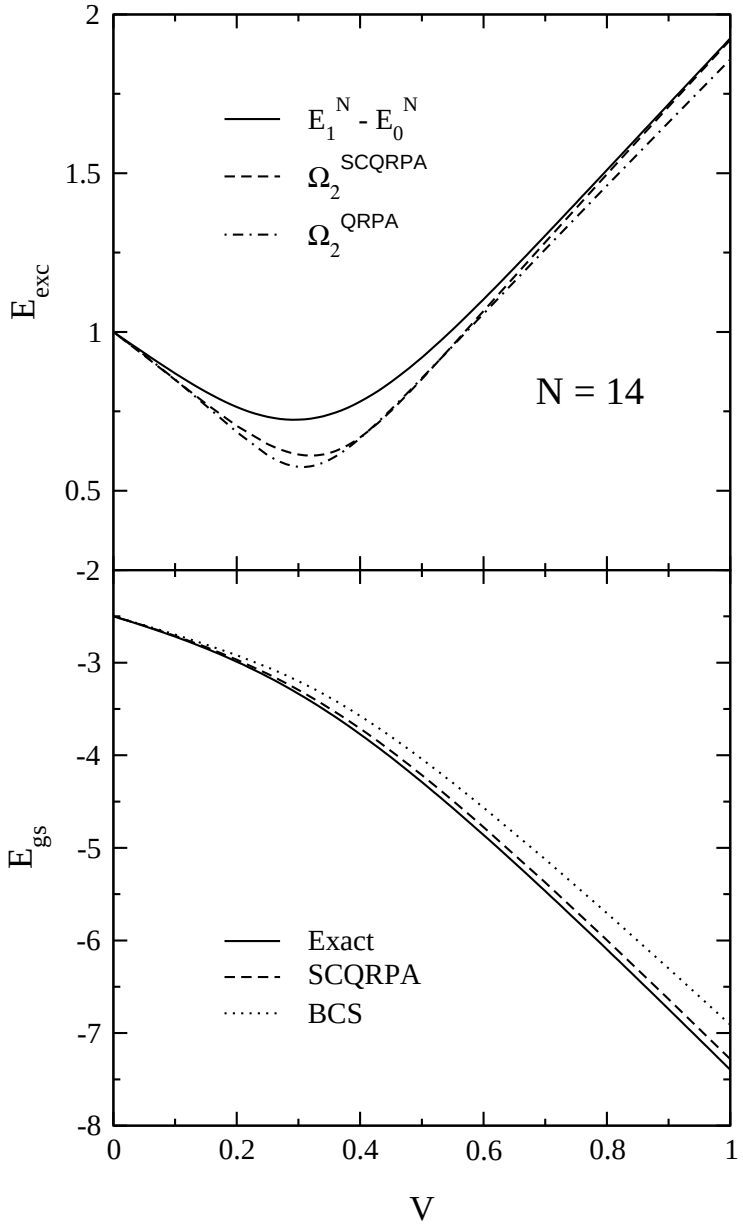

FIG. 4.5 – Même quantités que la figure (4.1), pour $N = 14$.

de rotation particulière dans l'espace de jauge de la solution exacte du problème. De plus, nous devons signaler que la valeur de l'énergie finie est liée à la taille finie du système, c'est-à-dire, le nombre fini de particules dans le système. Par ailleurs, dans une situation réaliste, on peut inclure dans l'opérateur RPA les termes de la forme $\alpha_k^\dagger \alpha_{k'}$ pour $k \neq k'$ (DS96). Seulement les opérateurs hermitiques $\alpha_k^\dagger \alpha_k$ doivent être exclus pour la raison déjâ mentionnée. Ces composantes correspondent, dans un système infini, à une impulsion de transfer nulle ; ils sont ainsi de mesure nulle. Par conséquent, dans un système infini nous avons aussi restauration totale de la symétrie.

D'autres quantités, qui sont intéressantes à calculer dans le formalisme SCQRPA, sont les

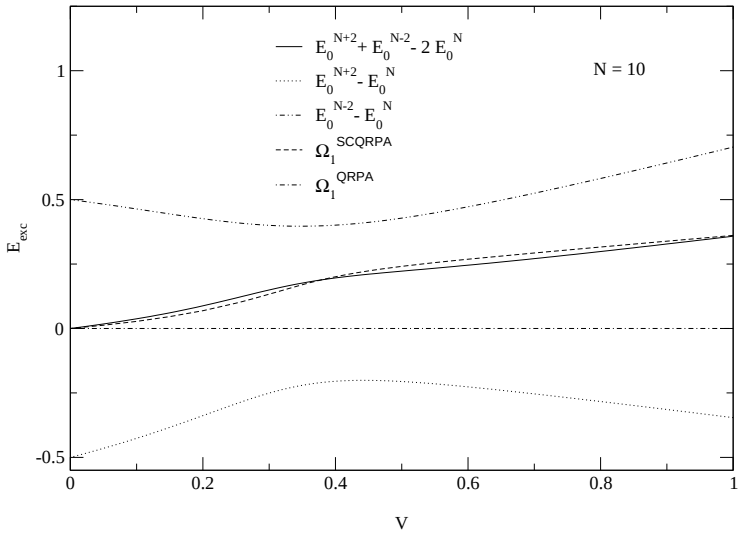

FIG. 4.6 – Energie d'excitation du mode mou (spurieux) (les énergies sont divisées par 2ϵ) en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 10$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$.

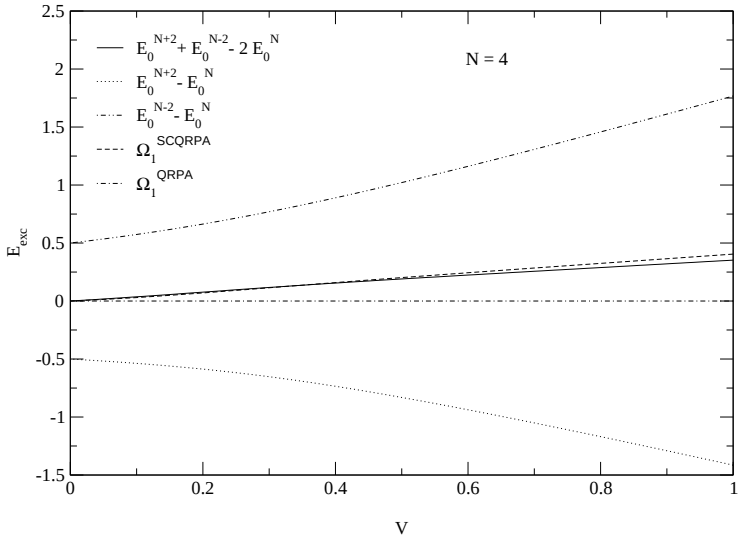

FIG. 4.7 – Même quantités que la figure (4.6), pour $N = 4$.

potentiels chimiques directement liés à la différence des énergies fondamentales. Par exemple, sur les figures (4.9), (4.10) et (4.11) nous représentons les potentiels chimiques $\mu^{\pm} = \pm\frac{1}{2}(E_0^{N\pm2} - E_0^N)$ obtenues par le calcul exact et à partir de calculs séparés avec la méthode SCQRPA, en faisant la différence des énergies fondamentales. Nous voyons que, pour $J = 11/2$ et $N = 4$ et 8, l'accord des résultats de la méthode SCQRPA avec les valeurs exactes est excellent et on a en outre une amélioration forte par rapport à la méthode BCS. Les mêmes résultats sont obtenus pour

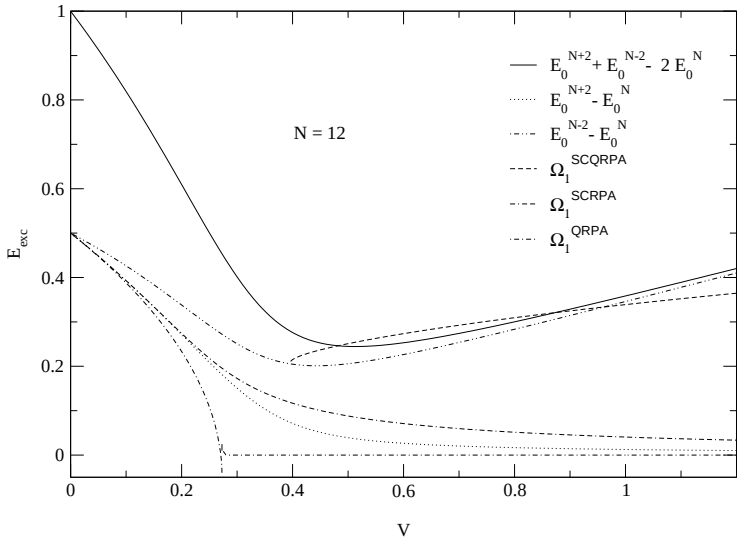

FIG. 4.8 – Même quantités que la figure (4.6), pour $N = 12$.

le potentiel chimique μ qui doit être calculé à partir de $\mu = \frac{1}{2}(\mu^+ + \mu^-)$ dans le calcul exact. Ce potentiel chimique moyen μ doit être identifié avec le multiplicateur de Lagrange μ utilisé pour restaurer la symétrie de nombre total de particules (2.16) dans les deux méthodes BCS et SCQRPA. Cette identification est montrée sur chacune des figures (4.9), (4.10) et (4.11). Sur la figure (4.11) nous montrons les résultats des potentiels chimiques μ et $\mu^{\pm}$, dans le cas symétrique $J = 11/2$ et $N = 12$. Nous voyons que les remarques faites pour les cas non symétriques restent vraies. Cependant, nous notons la situation particulière relative au potentiel chimique moyen μ pour lequel les solutions exactes, BCS et SCQRPA coïncident exactement.

Il est aussi intéressant de représenter les potentiels chimiques $2\mu^+$ et $2\mu^-$ de façon symétrique. Cela nous permet d'étudier la validité de nos approximations sur les nombres d'occupation. Cette étude ne peut être réalisée que dans la région du fluide normal où l'état fondamental RPA peut être construit (voir paragraphe 3.2.1). Nous allons présenter les résultats de la méthode ppSCRPA où les valeurs moyennes des nombres d'occupation sont calculées, une fois à l'aide du développement (2.74) et une fois en utilisant l'état fondamental RPA. Sur la figure (4.12) nous représentons les deux valeurs propres de la méthode ppSCRPA qui sont identifiées aux potentiels chimiques. Nous rappelons d'abord que la solution ppSCRPA existe même dans la phase superfluide, bien que, en principe, elle ne devrait pas exister. En général, dans d'autres modèles (BSC$^+$01), la solution de la méthode SCRPA (dans la phase "sphérique" (normale)) cesse d'exister dès qu'on pénètre dans le régime "déformé". Par contre, dans ce modèle, comme nous le voyons sur la figure (4.12), la solution normale existe et donne en outre des resultats raisonnables pour les potentiels chimiques pour toutes les valeurs de V (couplage), bien que l'énergie du fondamental diverge d'une manière significative, dès que le couplage devient suffisamment fort (voir bas de la figure (4.1)). Nous notons aussi que le modèle n'est pas parfaitement symétrique car il y a une asymétrie entre les deux potentiels chimiques. Il apparaît de plus que la solution de la méthode ppSCRPA devient très sensible aux approximations dans la région superfluide. D'ailleurs, dès que la modèle entre dans le régime superfluide, les résultats obtenus par le développement (2.74) s'eloignent de ceux calculés avec l'état fondamental RPA. Nous devons aussi signaler que les développements de nombres d'occupation utilisés dans le calcul sont poussés à l'ordre deux pour $\hat{N}_{q,j}$ et $\hat{N}^2_{q,j}$ et à l'ordre un pour $\hat{N}_{q,j}\hat{N}_{q,j'}$. Ceci montre que ces développements sont rapidement convergents et notre méthode pour calculer les nombres d'occupation constitue donc une bonne

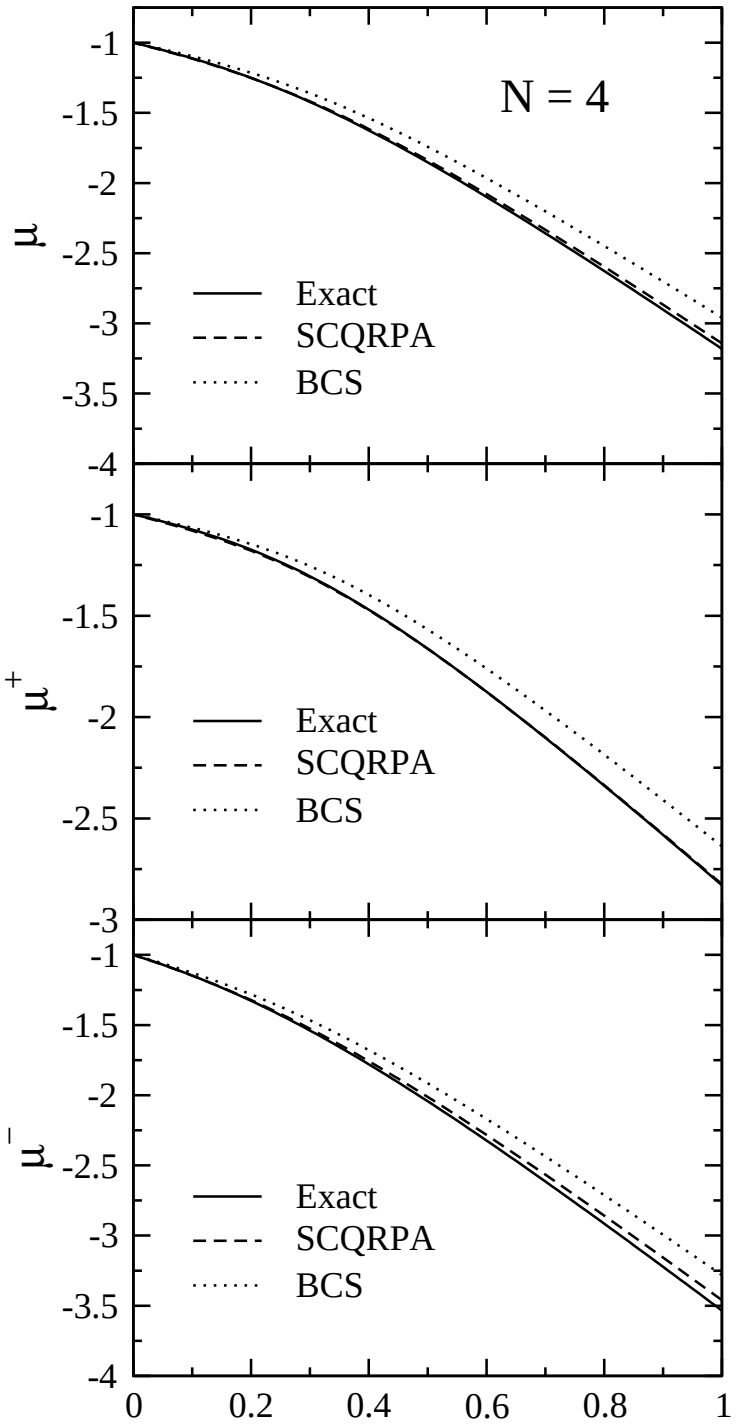

FIG. 4.9 – Comparaison entre les résultats exacts, SCQRPA et BCS des potentiels chimiques $\mu = \frac{1}{2}(\mu^+ + \mu-)$ et $\mu^\pm = \pm\frac{1}{2}(E_0^{N\pm2} - E_0^N)$, pour un nombre de particules $N = 4$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$.

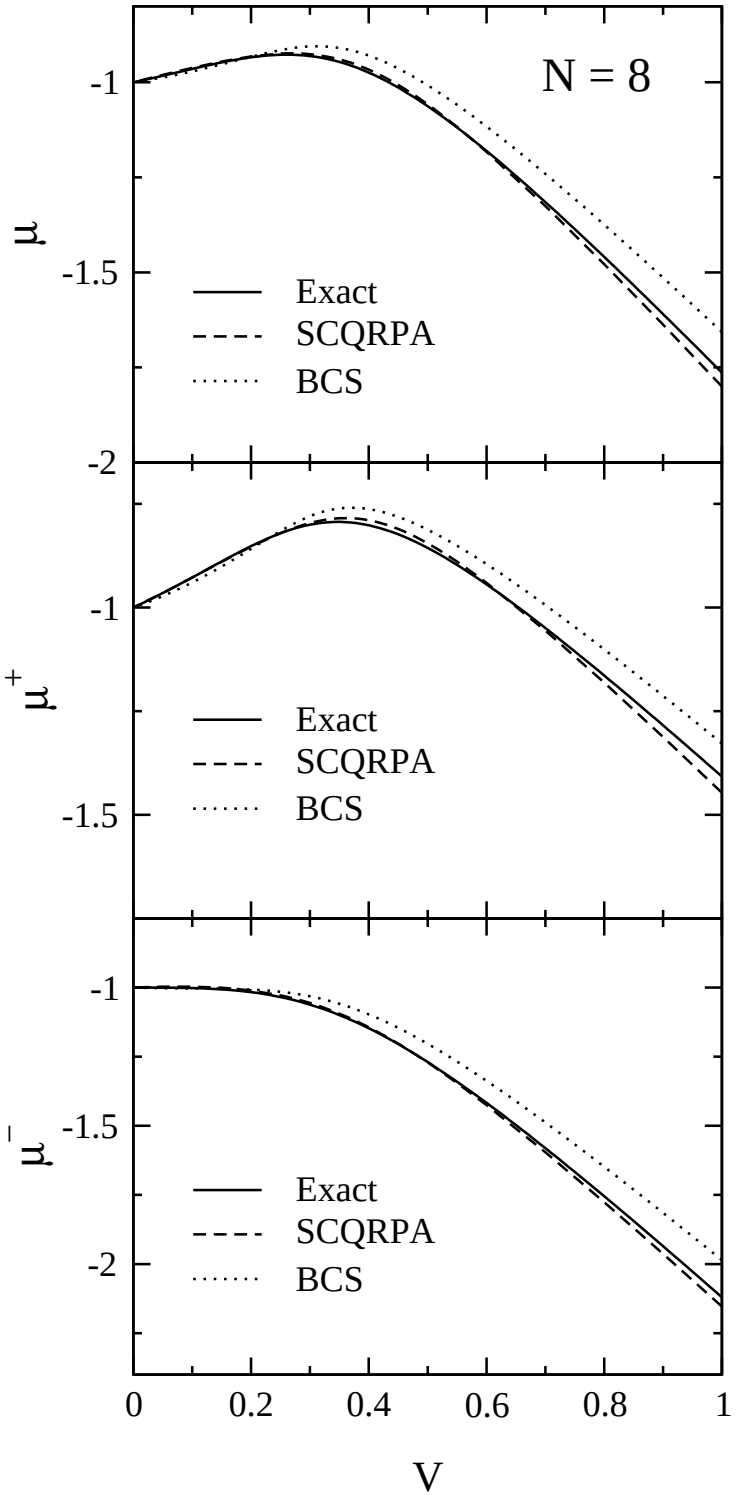

FIG. 4.10 – Même quantités que la figure (4.9), pour $N = 8$.

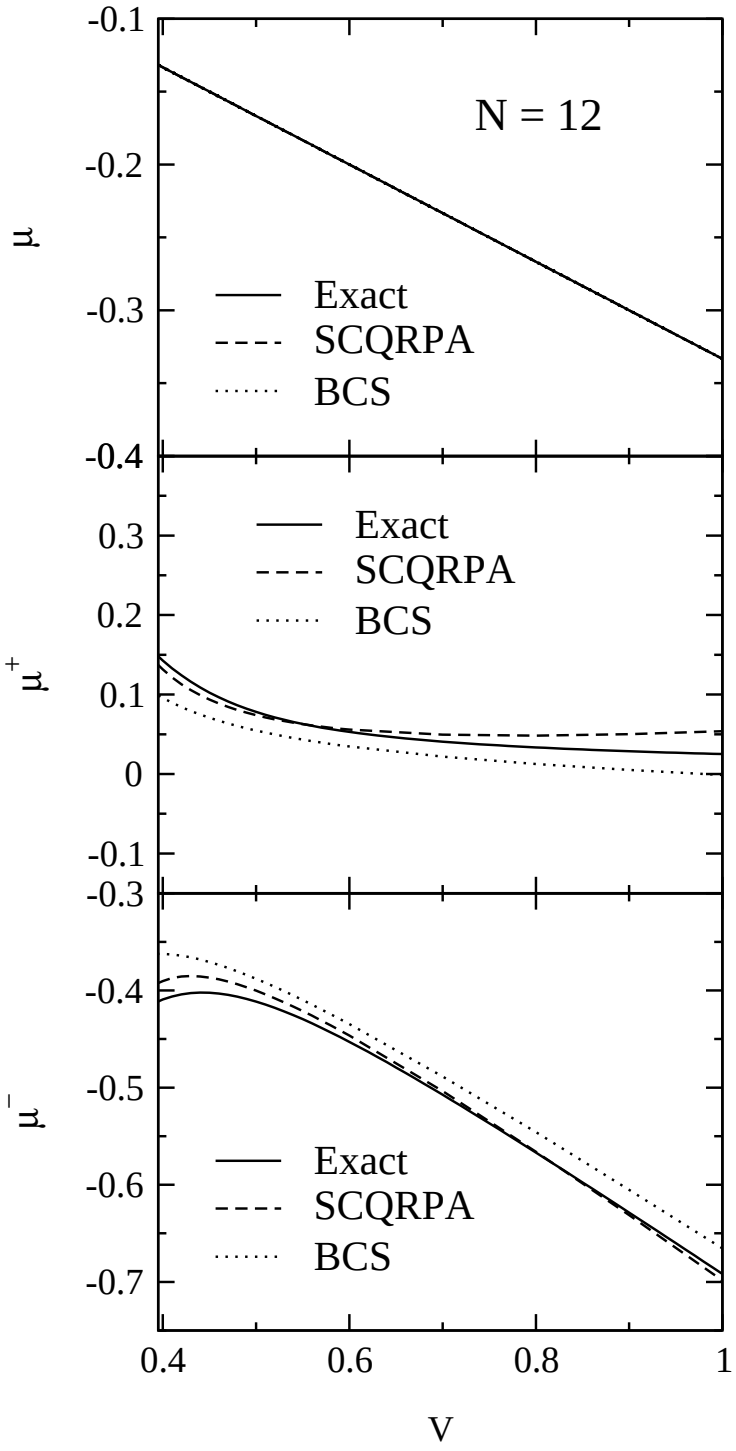

FIG. 4.11 – Même quantités que la figure (4.9), pour $N = 12$.

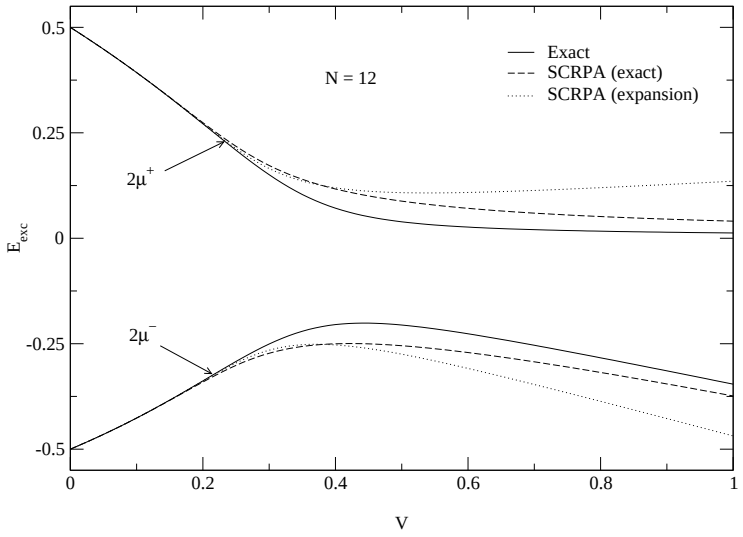

FIG. 4.12 – Energies d'excitation $2\mu^+$ et $2\mu^-$ (les énergies sont divisées par 2ϵ) en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 12$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$. Les lignes continues correspondent aux résultats exacts, les lignes interrompues aux résultats ppSCRPA ayant le nombre d'occupation calculé avec l'état fondamental exact (3.29), et les lignes pointillés aux résultats ppSCRPA ayant le nombre d'occupation calculé avec le développement (2.74).

approximation dans le cas non superfluide.

Nous pouvons nous convaincre de cela en calculant, par exemple, le nombre de particules dans le niveau supérieur donné par :

$$\langle \hat{N}_1 \rangle = (u_1^2 - v_1^2)\langle \hat{N}_{q,1} \rangle + 2\Omega v_1^2. \tag{4.7}$$

Le résultat est représenté sur la figure (4.13). Dans cette figure nous avons représenté en plus des résultats SCRPA, les résultats RPA, champ moyen et aussi les résultats exacts (dans la phase normale bien sûr les résultats sont ceux de la pp-SCRPA). Dans la phase du fluide normal, nous remarquons que notre méthode améliore nettement le résultat par rapport à la méthode du champ moyen, cependant, par rapport à la méthode RPA standard l'amélioration est faible. Dans la phase superfluide, nous notons que, en comparaison avec le résultat du calcul champ moyen, la méthode SCQRPA améliore légèrement le résultat. Nous notons aussi que la discontinuité déjà rencontrée dans la méthode SCRPA, se répercute sur toutes les figures alors que les résultats de la RPA standard diverge à la transition de phase. Il est par ailleurs intéressant de noter que le calcul avec la méthode QRPA, pour certaines grandeurs physiques, n'est pas systématique. Bien que nous ayons une expression explicite du nombre de particules, du fait du mode mou, nous ne pouvons pas le calculer "proprement". En effet, à cause de ce mode, ayant des amplitudes RPA infinies, les relations de fermeture et d'orthonormalisation sont violées. Par conséquent, dans la méthode QRPA standard nous ne pouvons pas calculer cette quantité. A la transition de phase, où la RPA standard produit deux modes "mous", la méthode s'effondre.

Venons en à la méthode SCRPA ; d'après les résultats obtenus et analysés jusqu'ici, on remarque qu'elle améliore la prise en compte des corrélations dans l'état fondamental ainsi que dans les états excités. Ainsi, comme nous venons de le voir, sa version quasi-particules reproduit avec une bonne précision tous les résultats exacts. Pour aller plus loin, dans l'étude des corrélations dans notre méthode, nous envisageons maintenant d'analyser les résultats du calcul de la variance du nombre total de particules, qui est une quantité intimement liée aux corrélations. Tout d'abord, nous

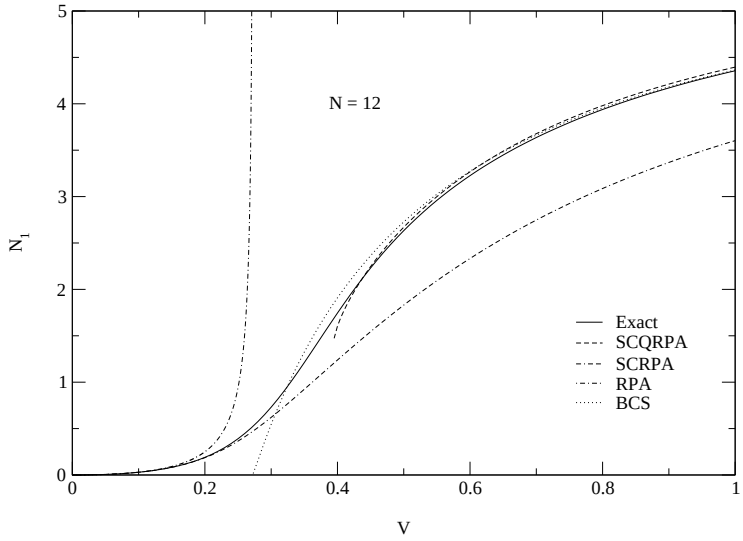

FIG. 4.13 – Nombre de particules dans le niveau supérieur N_1 en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour $N = 12$. Le spin de chaque niveau est égal à $J = 11/2$.

rappelons que, comme dans le calcul du nombre de particules dans le niveau supérieur, nous ne pouvons pas calculer la variance dans la méthode QRPA. Cela est du au fait que, dans cette méthode, a cause de l'apparition du mode mou, les relations de fermeture et d'orthonormalisation, ne sont pas satisfaites. Nous présentons donc uniquement les résultats de notre méthode et de la méthode BCS. Les résultats sont ainsi représentés sur les figures (4.14), (4.15) et (4.16), pour les nombres de particules $N = 10$, $N = 12$ et $N = 14$, respectivement, toujours pour le même spin $J = 11/2$. Dans ces trois figures nous constatons que l'amélioration apportée par notre méthode est très importante en comparaion avec la méthode BCS, dans n'importe quelle configuration considérée. Un dernier point nécessitant d'être examiné dans ce modèle, avec la méthode SCQRPA, est de savoir si les corrélations d'appariements sont augmentées ou diminuées par rapport au calcul BCS. Pour cela, nous considérons la fonction de corrélation suivante :

$$\mathcal{C} = \frac{1}{\Omega} \sum_{j=\pm 1} \left(\langle A_j^\dagger A_j \rangle - \frac{1}{4\Omega^2} \langle \hat{N}_j \rangle \langle \hat{N}_j \rangle \right). \tag{4.8}$$

Notons d'abord, que dans l'état fondamental BCS, cette expression se réduit a l'expression suivante :

$$\mathcal{C}_{BCS} = \sum_{j=\pm 1} u_j^2 v_j^2. \tag{4.9}$$

De plus, nous signalons que, en général, l'expression (4.8) contient des termes non diagonaux (Del01). Néanmoins, puisqu'il est difficile d'exprimer ces termes en fonction des amplitudes RPA dans le cas de notre méthode, nous n'allons pas les considérés. De plus, dans la méthode SCQRPA, nous pouvons calculer l'expression (4.8) de deux façons différentes. Dans la première, nous utilisons les amplitudes u_j et v_j à partir des équations de champ moyen généralisé (méthode de champ moyen renormalisé) et ce résultat sera noté $\mathcal{C}_{r-BCS}$. Dans la deuxième, nous calculons les valeurs moyennes dans le vide de la méthode SCQRPA et on notera le résultat $\mathcal{C}_{SCQRPA}$. Les résultats sont représentés sur les figures (4.17) et (4.18), pour un nombre de particules $N = 12$ et $N = 14$, respectivement. Le spin de chaque niveau est toujours choisi égal à $J = 11/2$. La situation pour $N = 10$ n'est pas représentée puisqu'elle est parfaitement équivalente

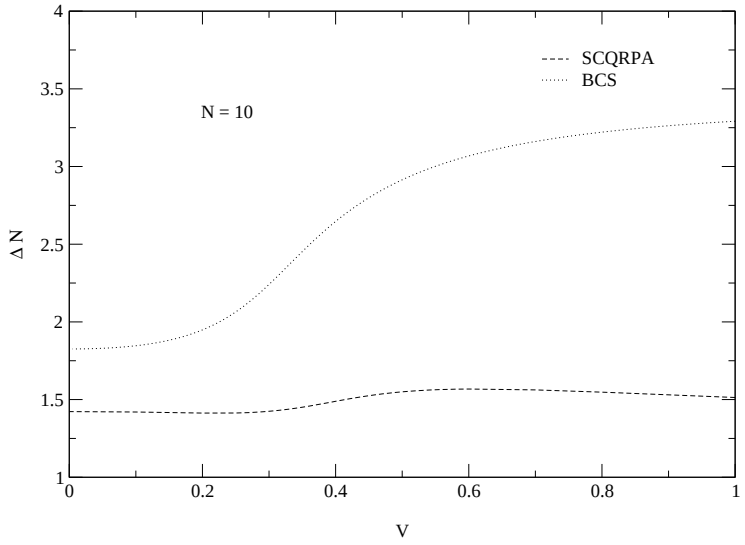

FIG. 4.14 – La variance du nombre total de particules en fonction de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 10$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$.

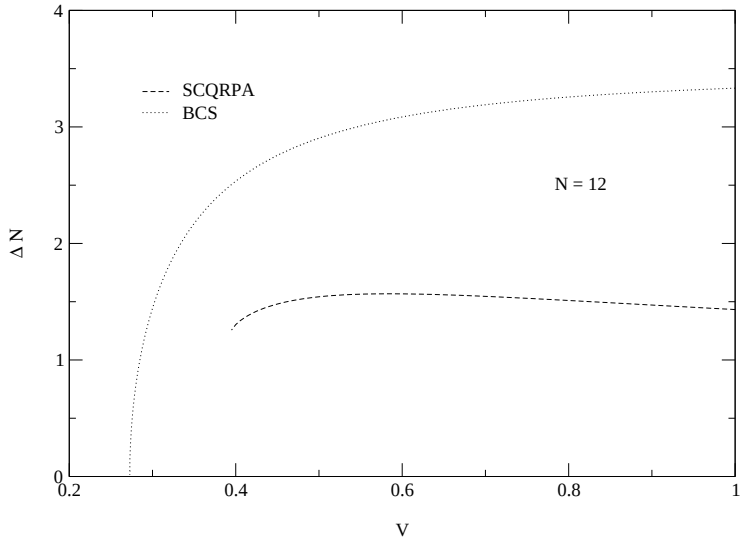

FIG. 4.15 – Même quantités que la figure (4.14), pour $N = 12$.

au cas où $N = 14$, puisque ces deux configurations sont symétriques. Nous remarquons que la méthode BCS renormalisée (r-BCS) diminue les corrélations d'appariements par rapport à la méthode BCS standard. Cette suppression de l'appariement peut être expliquée en analogie avec la suppression du gap lors de l'étude de la matière neutronique infinie avec des théories renormalisées (AWP89; SCBL96; LSZ01). Cependant, dans ce modèle, la suppression des corrélations d'appariement dans la méthode r-BCS est trompeuse. En effet, la méthode SCQRPA montre

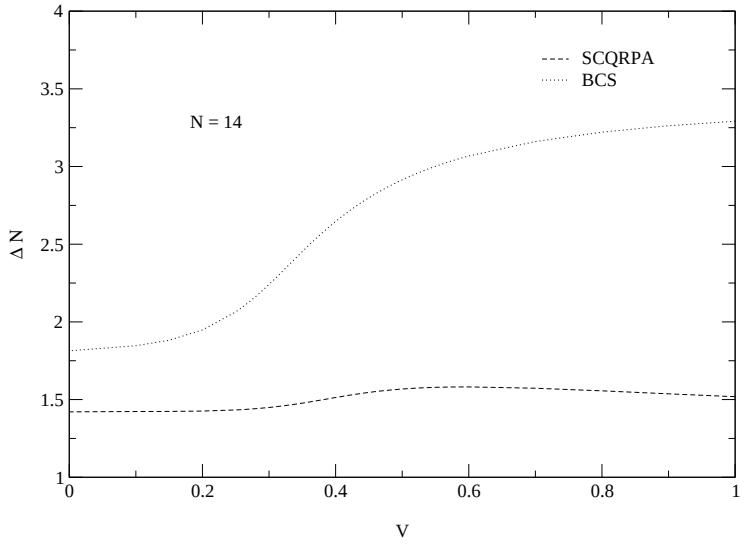

FIG. 4.16 – Même quantités que la figure (4.14), pour $N = 14$.

plutôt une augmentation des corrélations d'appariement dans notre modèle. Il n'est cependant pas évident que cette conclusion puisse être reprise dans le cas de la matière neutronique infinie.

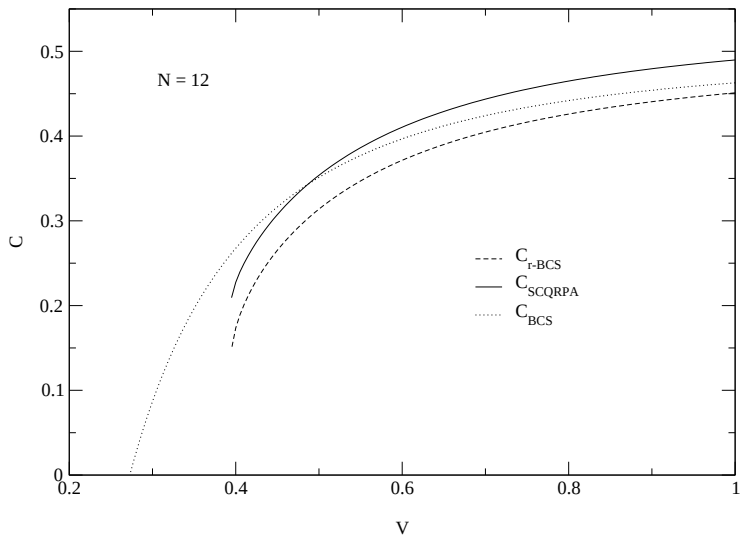

FIG. 4.17 – La fonction de corrélation $\mathcal{C}$ en function de la variable $V = g\Omega/2\epsilon$ et pour un nombre de particules $N = 12$. Le spin de chaque niveau est $J = 11/2$.

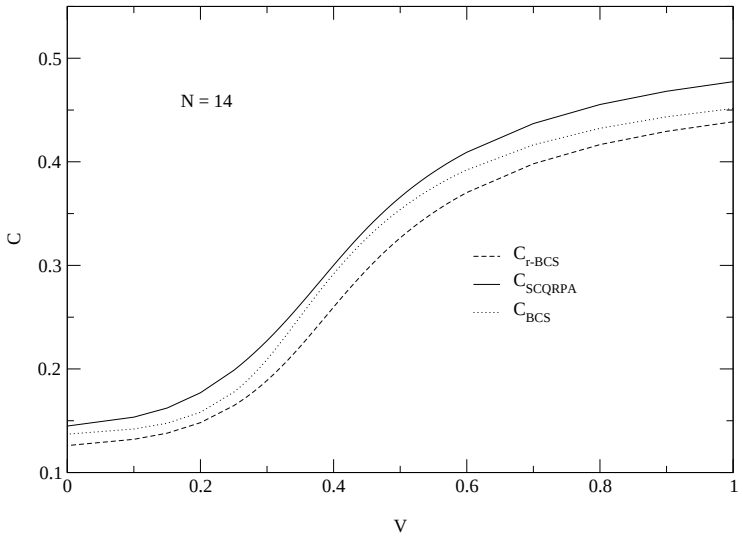

FIG. 4.18 – Même quantités que la figure (4.17), pour $N = 14$.

4.3 Comparaison avec d'autres travaux

Le modèle d'appariement à deux niveaux a récemment servi de base pour tester les diverses généralisations de la théorie BCS. Le travail le plus récent est celui de Sambataro et Dinh Dang (SDD99). Dans ce travail, les auteurs ont utilisé ce que l'on appelle la méthode de "bosonisation" des opérateurs fermioniques. Au lieu de traiter les opérateurs de paires de quasi-particules directement, comme ce que nous faisons ici, les auteurs "bosonisent" les opérateurs de paires de quasi-particules et développent le Hamiltonien du modèle au quatrième ordre ("boson mapping method") en fonction de nouveaux opérateurs bosoniques. Ensuite, ils utilisent ces opérateurs bosoniques et ils appliquent la méthode QRPA (cette méthode va être notée BF-RPA : RPA in boson formulation). Ils obtiennent alors des équations de type Hartree-Fock-Bogoluibov non linéaires qui sont tout à fait analogues à nos équations SCQRPA. Les coefficients de transformation de quasi-particules sont obtenus, comme d'habitude, par minimisation de l'énergie de l'état fondamental par rapport aux coefficients de la transformation. Ainsi, ils obtiennent aussi des équations de type champ moyen renormalisé, couplées aux amplitudes RPA, analogues à nos équations de champ moyen généralisé. Le système d'équations couplées est alors résolu d'une manère self-consistante. Pour une meilleure comparaison, nous avons choisi, les mêmes configurations de spin J et de nombre de particules N comme dans la référence (SDD99). Une première remarque est que, dans le cas $J = 11/2$, qui correspond à une dégénérescence assez élevée des niveaux, les opérateurs de paires de fermions sont collectifs et la bosonisation est certainement une procédure valable. Il n'est donc pas inopiné, que les résultats de la méthode de Sambataro et Ding Dang soient très proches des nôtres. Une comparaison détaillée montre que nos résultats sont systématiquement légèrement plus proches des résultats exacts. Cela peut être du au fait que nous conservons le caractère fermionique de nos opérateurs et nous ne nous servons pas de la bosonisation. De plus, nous traitons exactement les règles de commutation de paires de fermions. Cependant, puisque la différence entre les deux résultats est très petite, il est difficile de tirer d'autres conclusions. Pourtant, dans la référence (SDD99), les auteurs donnent une comparaison explicite des résultats, dans le cas symétrique de spin $J = 19/2$. Nous pouvons alors effectuer une comparaison pour l'énergie du fondamental pour la même configuration. Nous la donnons dans le tableau 4.1, où nous montrons les résultats pour quatre approches différentes des problèmes à N corps : notre approche (SCQRPA),

celle de Sambataro et Ding Dang (BF-RPA), Quasi-particule standard RPA (QRPA) et le méthode BCS. Bien sûr, nous nous rappelons que dans notre approche, dans la zone de fluide normal, nous employons la version ppSCRPA tandis que, dans la zone superfluide, nous employons la version généralisée de la méthode SCRPA (SCQRPA). Dans le tableau 4.1 nous constatons que, dans les deux zones du modèle (la transition de phase est a $V_c \simeq 0.2564$), notre méthode présente une amélioration importante par rapport à toutes les autres méthodes. Pour accentuer les différences on doit travailler avec des configurations ayant des dégénérescences plus faibles où les contraintes du principe Pauli deviennent beaucoup plus sévères. Nous rappelons ici que la méthode SCRPA a été appliquée au cas $N = 2$, dans le modèle à plusieurs niveaux dans la référence (HMDS02) et le résultat exact a été retrouvé. Il serait donc intéressant de voir, dans ce cas, les résultats de l'approche avec la bosonisation (SDD99). Bien que notre approche est très semblable à celle de la référence (SDD99), nous avons considéré plusieurs problèmes qui sont restés ouverts dans ce travail (SDD99) tels que, par exemple, les résultats concernant la valeur propre Ω_1 de la méthode SCQRPA. Dans la référence (SDD99), les auteurs n'ont pas donné d'interprétation de cette solution importante (c'est-à-dire la solution Ω_1 de leur système d'équations). Cependant, nous supposons que leurs résultats pour cet état, bien qu'ils n'aient pas donné de valeurs numériques, peuvent être également interprétés comme la différence $2(\mu^+ - \mu^-)$ comme dans notre cas. La fluctuation du nombre de particules n'est pas non plus considérée dans la référence (SDD99). Nous pensons que leurs résultats concernant la fluctuation du nombre de particules seront proches des nôtres. La transition à la phase superfluide n'a pas été traitée dans l'article (SDD99). Cependant, tous ces aspects seront tout à fait semblables dans les deux approches tant que la "bosonisation" des opérateurs de paires de fermions reste valable. Nous pensons cependant qu'il est plus commode de conserver le caractère fermionique des opérateurs.

V	Exact	SCQRPA	BF-RPA	QRPA	BCS
-0.50	-18.55446	-18.55410	-18.55360	-18.56890	-18.00000
-0.45	-18.66849	-18.66821	-18.66784	-18.67924	-18.20000
-0.40	-18.78706	-18.78686	-18.78660	-18.79474	-18.40000
-0.35	-18.91072	-18.91058	-18.91040	-18.91592	-18.60000
-0.30	-19.04010	-19.04001	-19.03990	-19.04338	-18.80000
-0.25	-19.17600	-19.17594	-19.17588	-19.17787	-19.00000
-0.20	-19.31939	-19.31936	-19.31933	-19.32031	-19.20000
-0.15	-19.47153	-19.47151	-19.47150	-19.47188	-19.40000
-0.10	-19.63406	-19.63405	-19.63405	-19.63415	-19.60000
-0.05	-19.80919	-19.80919	-19.80919	-19.80919	-19.80000
0.00	-20.00000	-20.00000	-20.00000	-20.00000	-20.00000
0.05	-20.21101	-20.21101	-20.21101	-20.21102	-20.20000
0.10	-20.44921	-20.44918	-20.44917	-20.44953	-20.40000
0.15	-20.72625	-20.72599	-20.72593	-20.72899	-20.60000
0.20	-21.06339	-21.06130	-21.06100	-21.08080	-20.80000
0.25	-21.50260	-21.48733	-21.48640	-21.64174	-21.00000
0.30	-22.12491	-22.03638	-22.03620	-22.13484	-21.37193
0.35	-23.03321	-22.80453	-22.77899	-22.99299	-22.21880
0.40	-24.24609	-23.99588	-23.97001	-24.21285	-23.37895
0.45	-25.68929	-25.42829	-25.39821	-25.65779	-24.74795
0.50	-27.29077	-27.01885	-26.98390	-27.25633	-26.26316

TAB. 4.1 – Les résultats de l'énergie fondamentale (en unité arbitraire) comme fonction de la variable $V = \frac{g\Omega}{2\epsilon}$, pour un nombre de particules $N = 20$. Le spin de chaque niveau est $J = 19/2$.

Le modèle d'appariement à deux niveaux a été aussi utilisé dans le travail de Passos *et al.* (PTPK98). Dans ce travail, les auteurs ont utilisé la méthode SCRPA et ils ont considéré

seulement la phase de fluide normal. Les résultats sont tout à fait analogues aux nôtres. De plus, dans ce travail, une nouvelle approximation (ce que l'on appelle la RPA renormalisée (r-RPA)) a été considérée. Dans cette approximation, seuls les nombres d'occupation à une particule sont affectés par les corrélations de l'état fondamental (c'est-à-dire, $\langle \hat{N}\hat{N}\rangle = \langle \hat{N}\rangle\langle \hat{N}\rangle$). D'ailleurs, dans ce travail, Passos *et al.* (PTPK98) ont reproduit, presque parfaitement, le résultat exact pour les nombres d'occupation, pour tous les couplages, avec la méthode r-RPA et non avec la SCRPA. Ce résultat a été interprété comme un avantage de la r-RPA par rapport à la méthode SCRPA. Par conséquent, ils ont conclu que la méthode SCRPA sous-estime les corrélations. D'après les travaux déjà faits avec la méthode SCRPA, nous ne pouvons pas adhérer à cette conclusion. Comme nous l'avons discuté précédemment, la violation du principe de Pauli, qui est respecté dans la méthode SCRPA, entraîne une surestimation des corrélations. Accidentellement, il se peut que si on brise, convenablement, le principe de Pauli on retrouve les résultats exacts. Apparemment, c'est ce qui s'est passé pour les nombres d'occupation dans la r-RPA et aussi pour l'énergie de l'état fondamental dans la QRPA. Cependant, nous pensons que ce résultat ne peut pas être généralisé. De plus, pour d'autres modèles ou d'autres situations physiques, le scénario peut être complètement différent. Donc si les résultats de la méthode SCRPA ne sont pas bons, il ne faut pas faire d'approximation supplémentaire mais plutôt l'améliorer (c'est-à-dire, inclure des configurations d'ordre supérieur).

Venons en encore une fois à la méthode QRPA. Dans le travail de Hagino et Bertsch (HB00a), la méthode QRPA est préconisée. Cela permet d'avoir une alternative numériquement viable par rapport à la méthode BCS et la méthode de Nogami-Lipkin (Nog64; Lip60). Il est certainement vrai que, dans des cas réalistes, l'utilisation de la méthode SCRPA demande des efforts numériques considérables. Pourtant, avec les ordinateurs modernes, nous pensons que la mise en oeuvre de la méthode SCRPA est possible. Dans une première étape il est intéressant d'étudier la méthode QRPA. Par exemple, si on prévoit de faire des calculs à grande échelle pour un grand nombre de noyaux. Cependant, il faut toujours se rappeler que la méthode QRPA peut conduire à des erreurs très importantes qui seront certainement plus prononcées dans des situations où le système est proche d'une transition de phase.

4.4 Conclusion

Dans cette étude nous nous sommes intéressés, à la description de la superfluidité dans les systèmes fermioniques à partir d'une approche microscopique self-consistante, et nous avons appliqué la méthode SCQRPA à deux modèles exactement solubles. La comparaison des résultats de la méthode SCQRPA avec ceux obtenus à l'aide d'autres méthodes, à savoir la QRPA, BCS et HF, a montré que la SCQRPA constitue réellement un outil très puissant permettant le traitement cohérent des corrélations dans l'état fondamental et aussi dans les états excités des systèmes de fermions. En effet, lors de son application à l'étude de la superfluidité des systèmes fermioniques elle a produit de très bons résultats pour toutes les observables physiques considérées. De plus, contrairement aux autres méthodes considérées, à savoir les méthodes HF, BCS et QRPA (qui bien que le système soit fini présentent une brisure spontanée de symétrie et produisent alors un mode spurieux), la méthode SCQRPA dans l'approximation de Cranking ne montre pas cette brisure artificille de symétrie. Dans la méthode SCQRPA, tout dépend du choix de l'opérateur d'excitation RPA. Ainsi, si l'opérateur de symétrie, peut être incorporé dans l'opérateur d'excitation RPA, nous obtenons un mode de Goldstone et cela montre que la symétrie est parfaitement restaurée. Dans le cas contraire, c'est-à-dire, lorsque l'opérateur de symétrie ne peut pas être totalement inclu dans l'opérateur RPA (*i.e* quand l'opérateur de symétrie comprend de morceaux hermitiques), la valeur propre de basse énergie de la méthode SCQRPA représente une vraie énergie d'excitation du système.

Par comparaison avec le calcul exact et le calcul obtenu à l'aide d'autres méthodes, nous avons montré que la SCQRPA produit de très bons résultats, dans les deux phases du système et pour diverses configurations choisies. Ainsi, pour l'énergie du fondamental, contrairement à la méthode QRPA qui surestime les corrélations et brise ainsi le principe variationnel, la méthode

SCQRPA donne des résultats proche de ceux obtenus avec le calcul exact. Nous avons aussi analysé les deux énergies d'excitation fournies par notre méthode. Dans la phase superfluide et dans toutes les configurations étudiées, la valeur propre de haute énergie, comme nous l'avons vu, s'interprète comme en QRPA : elle a été identifiée à la vibration β, c'est-à-dire à l'énergie d'excitation du système à N particules. La comparaison avec la méthode QRPA des résultats de ce mode d'excitation montre une légère amélioration. Cependant, la comparaison des résultats concernant ce mode dans la phase du fluide normal, qui s'identifie à $-2\mu^-$ dans le calcul exact, montre une amélioration assez importante apportée par notre méthode par rapport à la QRPA, même dans la zone de transition de phase. Nous rappelons que le système ne présente une transition de phase que pour la configuration symétrique. Dans les autres configurations le système demeure toujours dans la phase superfluide.

Venons en au problème du mode spurieux. Du fait que le système soit en réalité fini il n'y a pas de réelle brisure spontanée de symétrie, contrairement à la méthode QRPA qui produit un mode nul ; notre méthode résoud ce problème et produit un mode de faible amplitude qui a été identifié à l'énergie d'excitation $2(\mu^+ - \mu^-)$. Cela constitue un résultat très important produit par notre méthode par rapport à la QRPA. De plus, dans la phase du fluide normal, où ce mode s'identifie à l'énergie d'excitation $2\mu^+$, notre méthode présente une amélioration assez importante par rapport à la méthode RPA standard qui "collapse" (donne une valeur négative) à la transition de phase. Cela montre que la méthode RPA s'éffondre à la transition de phase. Nous avons aussi remarqué, lors de notre étude sur les fluctuations dans le calcul du nombre total de particules, que notre méthode réduit fortement les fluctuations en comparaison avec la méthode BCS. Pour ce résultat, nous rappelons que la méthode QRPA ne permet pas ce calcul.

En résumé, dans un système fermionique, que ce soit dans la phase normale ou dans la phase superfluide, nous pouvons conclure que la méthode SCQRPA fournit de très bons résultats pour toutes les observables considérées. Cela n'est pas inopiné, puisque cette méthode permet la prise en compte des corrélations à deux particules d'une manière cohérente.

Chapitre 5

Modèle de la Séniorité

Dans ce chapitre, nous montrons que grâce à la souplesse de la méthode SCQRPA, nous pouvons contrôler avec précision la restauration d'une symétrie spontanément brisée au niveau de l'approximation du champ moyen dans un système fini. D'habitude, pour restaurer une symétrie on introduit une contrainte qui fixe la valeur moyenne de l'opérateur correspondant à cette symétrie à sa valeur exacte. Cela permet de rétablir la symétrie mais la mesure de la variance relative à cette symétrie montre que les fluctuations de cette symétrie ne sont pas nulles. Cela signifie que la restauration n'est pas totale. Afin de résoudre ce problème et éviter ces fluctuations, nous avons pensé à introduire aussi un autre paramètre de Lagrange pour fixer la valeur moyenne du carré de l'opérateur correspondant à cette symétrie à sa valeur exacte. Pour l'application de cette nouvelle idée qui constitue une extension de la méthode SCQRPA présentée précédemment, nous avons choisi le modèle de la séniorité. Généralement, ce modèle est utilisé pour l'étude de la superfluidité. Il est exactement soluble. Dans l'article de Dukelsky et Schuck (DS96), le modèle de la séniorité a été utilisé pour tester la méthode SCQRPA avec une seule contrainte et il a donné de très bon résultats par rapport à d'autres méthodes. Une caractéristique de ce modèle est qu'il demeure toujours dans la phase superfluide et que dans l'approximation du champ moyen la symétrie du nombre de particules est brisée.

5.1 Présentation du modèle

Le modèle de la Séniorité est constitué d'une seule couche dégénérée, dont la dégénérescence est de $2\Omega = 2j + 1$. Le Hamiltonien du modèle est donné par :

$$H = -g\Omega S^{\dagger} S \tag{5.1}$$

où g est la force de pairing. S et $S^{\dagger}$ sont les opérateurs de quasi-spin définies de la manière suivante :

$$S^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m>0} a_m^{\dagger} a_{-m}^{\dagger}, \quad S = (S^{\dagger})^{\dagger} \tag{5.2}$$

où m est le nombre quantique magnétique et les opérateurs $a_m^{\dagger}$ et $a_{-m}^{\dagger}$ crée chacun une particule dans l'état m et dans l'état renversé dans le temps $-m$, respectivement. L'opérateur nombre de particule est donné par :

$$\hat{N} = \sum_{m>0} (a_m^{\dagger} a_m + a_{-m}^{\dagger} a_{-m}). \tag{5.3}$$

Définissant les opérateurs quasi-spin $\tilde{S}^{\dagger}$, $\tilde{S}$ et $\tilde{S}^0$ par :

$$\tilde{S}^{\dagger} = \sqrt{\Omega} S^{\dagger}, \quad \tilde{S} = (\tilde{S}^{\dagger})^{\dagger}, \quad \tilde{S}^0 = \frac{\hat{N} - \Omega}{2} \tag{5.4}$$

et utilisant les règles de commutation des opérateurs a et $a^\dagger$, on peut établir les règles de commutation suivantes :

$$[\tilde{S}^\dagger, \tilde{S}] = 2\tilde{S}^0, \quad [\tilde{S}^0, \tilde{S}^\dagger] = \tilde{S}^\dagger, \quad [\tilde{S}^0, \tilde{S}] = -\tilde{S}. \tag{5.5}$$

On voit donc que les trois opérateurs ont les propriétés de commutation des opérateurs de moment cinétique. Les opérateurs $\tilde{S}^\dagger$ et $\tilde{S}$, sont respectivement, les opérateurs d'addition et de retrait analogue aux opérateurs de moment cinétique J_+ et J_-. D'une manière similaire, $\tilde{S}^0$ correspond à la composante z du moment cinétique J_0. Ainsi, le modèle satisfait une algèbre $SU(2)$. L'état fondamental exact d'une couche de N particules, avec N entier pair, est donné par $(S^\dagger)^{N/2}|-\rangle$ et l'énergie de l'état fondamental correspondante est de la forme :

$$E_0[N] = -\frac{g}{2}(\Omega + 1)N + \frac{g}{4}N^2 \tag{5.6}$$

5.2 QRPA Self-consistente

5.2.1 Opérateurs Quasi-particule

Pour n'importe quelle valeur du remplissage de la couche, le modèle demeure toujours dans la phase dite superfluide ou déformée, par conséquent, une méthode de champ moyen pour les quasi-particules est indispensable pour mener à bien l'étude dans ce modèle. Nous faisons donc la transformation de Bogoliubov qui transforme les opérateurs de particules à ceux de quasi-particules :

$$a_m^\dagger = u\alpha_m^\dagger + v\alpha_{-m}, \quad u^2 + v^2 = 1. \tag{5.7}$$

A l'aide de la transformation (5.7), on peut donc exprimer les opérateurs paires de quasi-particules et du nombre de quasi-particules, on obtient :

$$P^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m>0} \alpha_m^\dagger \alpha_{-m}^\dagger, \quad P = (P^\dagger)^\dagger \tag{5.8}$$

$$\hat{N}_q = \sum_{m>0} (\alpha_m^\dagger \alpha_m + \alpha_{-m}^\dagger \alpha_{-m}). \tag{5.9}$$

L'expression des opérateurs paire de particules en fonction des quasi-particules est immédiat :

$$\begin{aligned} S^\dagger &= u^2 P^\dagger - v^2 P - \frac{uv}{\sqrt{\Omega}} \hat{N}_q + uv\sqrt{\Omega}, \\ S &= u^2 P - v^2 P^\dagger - \frac{uv}{\sqrt{\Omega}} \hat{N}_q + uv\sqrt{\Omega}, \\ \hat{N} &= (u^2 - v^2)\hat{N}_q + 2uv\sqrt{\Omega}(P^\dagger + P) + 2\Omega v^2. \end{aligned} \tag{5.10}$$

De façon analogue, le carré de l'opérateur nombre de particules $\hat{N}^2$ est donné par :

$$\begin{aligned} \hat{N}^2 &= (u^2 - v^2)^2 \hat{N}_q^2 + 4v^2(\Omega(u^2 - v^2) - u^2)\hat{N}_q + 4uv\sqrt{\Omega}(u^2 - v^2)(P^\dagger \hat{N}_q + \hat{N}_q P) \\ &+ 4\Omega u^2 v^2 (P^\dagger P^\dagger + PP) + 8\Omega u^2 v^2 P^\dagger P + 4uv\sqrt{\Omega}(2\Omega v^2 + (u^2 - v^2))(P^\dagger + P) \\ &+ 4\Omega v^2(u^2 + \Omega v^2). \end{aligned} \tag{5.11}$$

5.2.2 Hamiltonien du modèle

Au niveau de l'approximation de champ moyen, la symétrie nombre de particules est brisée. D'habitude, pour restaurer cette symétrie nous introduisons un paramètre de Lagrange qui fixe la valeur moyenne de l'opérateur nombre de particule à la valeur exacte correspondante. Bien qu'avec cette technique on obtienne le bon nombre de particules (c'est-à-dire $\langle \hat{N} \rangle = N$), la mesure des fluctuations du nombre de particules qui se traduit par le calcul de la variance $\Delta N = \sqrt{\langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2}$,

montre que les fluctuations ne sont pas nulles. Elles sont nulles seulement dans des cas particuliers où la couche est semi-remplie ou totalement remplie. Cela signifie que, en dehors des cas particuliers semi-remplissage ou bien remplissage total, la restauration de cette symétrie n'est pas parfaite. En effet, tant que l'opérateur de symétrie nombre de particules n'est pas incorporé dans l'opérateur d'excitation RPA (nous rappelons que cela est du au fait que l'opérateur de symétrie est hermitique), la restauration de symétrie ne doit pas être exacte. Ainsi nous ne pouvons pas espérer restaurer cette symétrie exactement. Cependant, grâce à la souplesse de notre méthode, nous montrerons que nous pouvons contrôler correctement les corrélations induites par cette brisure. Ainsi, nous le montrerons, pour améliorer la restauration de cette symétrie, nous avons introduit un autre paramètre de Lagrange qui fixe le carré de l'opérateur nombre de particule à sa valeur exacte. Nous aurons ainsi restauré le bon nombre de particules, en imposant en plus que la variance doit être nulle. Cela élimine complètement les fluctuations du nombre de particules. Nous remarquons que cette méthode peut être vu comme étant une méthode de Cranking au second ordre. En outre, puisque nous allons présenter la méthode SCQRPA avec une contrainte et avec deux contraintes alors nous considérons le Hamiltonien contraint avec deux contraintes (l'autre cas s'obtient en éliminant tous les termes liés à la deuxième contrainte). Dans tout ce qui suit la méthode SCQRPA avec une contrainte sera notée SCQRPA^1 et celle avec deux contraintes SCQRPA^2. Par suite, le Hamiltonien contraint que nous allons utiliser est donné par :

$$H' = H - \mu_1 \hat{N} - \mu_2 \hat{N}^2 \tag{5.12}$$

où $\hat{N} = \sum_{m>0} (a^\dagger_m a_m + a^\dagger_{-m} a_{-m})$ est l'opérateur nombre de particules, μ_1 et μ_2 sont les deux paramètres de Lagrange permettant de fixer les valeurs moyennes comme indiqué précédemment $N = \langle \hat{N} \rangle$ et $N^2 = \langle \hat{N}^2 \rangle$. Dans la base des quasi-particules le Hamiltonien H' est donné par :

$$H' = H'_{00} + H'_{11} + H'_{20} + H'_{22} + H'_{31} + H'_{40} \tag{5.13}$$

$$\begin{aligned}
H'_{00} &= -g\Omega(\Omega u^2 v^2 + v^4) - 2\mu_1 \Omega v^2 - 4\mu_2 \Omega v^2 (u^2 + \Omega v^2), \\
H'_{11} &= \left\{ g\Omega(2u^2 v^2 + \frac{v^4}{\Omega}) - \mu_1(u^2 - v^2) - 4\mu_2 v^2 (\Omega(u^2 - v^2) - u^2) \right\} \hat{N}_q, \\
H'_{20} &= \left\{ - g\Omega(\sqrt{\Omega}(u^2 - v^2)uv + \frac{2uv^3}{\sqrt{\Omega}}) - 2\sqrt{\Omega}\mu_1 uv \right. \\
&- \left. 4\sqrt{\Omega}\mu_2 uv(2\Omega v^2 + (u^2 - v^2)) \right\} (P^\dagger + P), \\
H'_{22} &= -(gu^2 v^2 + \mu_2 (u^2 - v^2)^2) \hat{N}_q^2 - (g\Omega(u^4 + v^4) + 8\mu_2 \Omega u^2 v^2) P^\dagger P, \\
H'_{31} &= (g\sqrt{\Omega}(u^2 - v^2)uv - 4\mu_2 \sqrt{\Omega} uv(u^2 - v^2))(P^\dagger \hat{N}_q + \hat{N}_q P), \\
H'_{40} &= (g\Omega u^2 v^2 - 4\mu_2 \Omega u^2 v^2)(P^\dagger P^\dagger + PP)
\end{aligned} \tag{5.14}$$

5.2.3 Opérateur d'excitation RPA

Par analogie avec le cas du modèle de pairing à deux niveaux, l'opérateur d'excitation RPA sera pris sous la forme suivante :

$$Q^\dagger = X\bar{P}^\dagger - X\bar{P}, \quad X^2 - Y^2 = 1. \tag{5.15}$$

avec,

$$\bar{P}^\dagger = \frac{P^\dagger}{\sqrt{1 - \frac{\langle \hat{N}_q \rangle}{\Omega}}}. \tag{5.16}$$

Puisque l'équation (5.15) peut être considéré comme une transformation de Bogoliubov des opérateurs de paire de fermions, on peut donc interpréter les équations SCQRPA comme étant les

équations du champ moyen correspondantes. En d'autres termes, les équations SCQRPA sont les équations du champ moyen d'un gaz de fluctuations quantiques de paires. On peut directement vérifier comme dans la deuxième partie, que la relation (5.15) peut être inversé :

$$\bar{P}^\dagger = XQ^\dagger + YQ. \tag{5.17}$$

Les états excités dans la méthode SCQRPA, comme cela a été déjà vu, sont donnés par :

$$|\nu\rangle = Q^\dagger|\mathrm{RPA}\rangle \tag{5.18}$$

où $|\mathrm{RPA}\rangle$ est l'état fondamental corrélé RPA défini à l'aide de la condition :

$$Q|\mathrm{RPA}\rangle = 0. \tag{5.19}$$

En utilisant la condition (5.19) et l'équation (5.17), on peut exprimer un certain nombre de valeurs moyennes en fonction des amplitudes RPA X et Y :

$$\begin{aligned}
\langle P^\dagger P\rangle &= Y^2(1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}),\\
\langle PP^\dagger\rangle &= X^2(1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}),\\
\langle P^\dagger P^\dagger\rangle &= \langle PP\rangle = XY(1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}).
\end{aligned} \tag{5.20}$$

5.2.4 Matrice RPA

Suivant la méthode expliquée dans la deuxième partie et par analogie avec le cas du modèle de l'appariement à deux niveaux, à partir de l'équation séculaire suivante :

$$\langle[\delta Q,[H',Q^\dagger]]\rangle = \omega\langle[\delta Q,Q^\dagger]\rangle, \tag{5.21}$$

on obtient les équations SCQRPA sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} A & B\\ -B & -A\end{pmatrix}\begin{pmatrix} X\\ Y\end{pmatrix} = \omega\begin{pmatrix} X\\ Y\end{pmatrix};\quad X^2-Y^2=1. \tag{5.22}$$

Les éléments de la matrice RPA peuvent être explicités en fonction des amplitudes X et Y comme suit :

$$\begin{aligned}
A &= \langle[\bar{P},[H',\bar{P}^\dagger]]\rangle\\
&= 2\Big(g\Omega\Big(2u^2v^2+\frac{v^4}{\Omega}\Big)-\mu_1(u^2-v^2)-4\mu_2v^2\Big(\Omega(u^2-v^2)-u^2\Big)\Big)\\
&- 4\Big(gu^2v^2+\mu_2(u^2-v^2)^2\Big)\Big(X^2+Y^2+\frac{\langle\hat{N}_q\rangle-\frac{\langle\hat{N}_q^2\rangle}{\Omega}}{1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}}\Big)-4(g-4\mu_2)u^2v^2XY\\
&+ \Big(g\Omega(u^4+v^4)+8\mu_2\Omega u^2v^2\Big)\Big(\frac{2}{\Omega}Y^2-\frac{1-2\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}+\frac{\langle\hat{N}_q^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}}\Big),
\end{aligned} \tag{5.23}$$

$$\begin{aligned}
B &= -\langle[\bar{P},[H',\bar{P}]]\rangle\\
&= 2(g-4\mu_2)\Big\{(u^4+v^4-4u^2v^2)XY-\Omega u^2v^2\Big(\frac{1}{\Omega}(X^2+Y^2)\\
&- \frac{1-2\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}+\frac{\langle\hat{N}_q^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}}\Big)\Big\}.
\end{aligned} \tag{5.24}$$

5.2.5 Minimisation de l'énergie

Comme dans le cas du modèle à deux niveaux, les équations du champ moyen standard sont obtenues en minimisant l'énergie $\langle H' \rangle$ par rapport aux deux paramètres u et v de la transformation de Bogoliubov. Dans le cas de ce modèle, les équations du champ moyen généralisé sont alors données par :

$$\frac{\partial \langle H' \rangle}{\partial u} + \frac{\partial \langle H' \rangle}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial u} \equiv \langle [H', \bar{P}^\dagger] \rangle = \langle [H', \bar{P}] \rangle = 0. \tag{5.25}$$

Cette dernière équation, qui peut être vérifiée en évaluant séparément le premier et le second membre, est très intéressante, puisqu'elle est équivalente à l'équation $\langle [H', Q] \rangle = i\dfrac{\partial}{\partial t}\langle Q(t) \rangle = 0$ qui doit être satisfaite à l'équilibre. Par conséquent, elle constitue une relation supplémentaire à l'approche EMM. Elle été utilisé pour la première fois par Dukelsky et Schuck (DS96). En utilisant la normalisation des amplitudes u et v, on peut immédiatement réécrire (5.25) sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ \Delta & -h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{5.26}$$

où,

$$h = -(g + 4\mu_2\Omega)v^2 - \mu_1, \tag{5.27a}$$

$$\Delta = (g\Omega + 4\mu_2)uv - (g - 4\mu_2)uv\left\{ 2(XY + Y^2) + \frac{\langle \hat{N}_q \rangle - \frac{\langle \hat{N}_q^2 \rangle}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_q \rangle}{\Omega}} \right\}, \tag{5.27b}$$

$$\epsilon = \sqrt{h^2 + \Delta^2}. \tag{5.27c}$$

On remarque que si on remplace le vide $|\mathrm{RPA}\rangle$ par le vide HFB non corrélé dans (5.27), à partir de (5.26) et si on suppose que :

$$Y = \langle \hat{N}_q \rangle = \langle \hat{N}_q^2 \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \mu_2 = 0 \tag{5.28}$$

alors on obtient les équations HFB standard. On peut donc en déduire, que les équations du champ moyen généralisé sont couplées aux équations SCQRPA (5.22) à travers les amplitudes X et Y. Cela constitue un aspect très satisfaisant de la théorie SCQRPA.

Avec ce dernier calcul et ces dernières remarques les seules inconnues qui restent pour fermer le système des équations RPA sont les nombres d'occupation de quasi-particules.

5.2.6 Energies d'excitation RPA

Dans la phase superfluide, bien que le système soit fini, la symétrie $\hat{N}$ est brisée spontanément d'une manière artificielle au niveau des approximations de champ moyen standard. Par conséquent, lors de l'utilisation de la méthode SCQRPA nous avons procédé à sa restauration en utilisant deux contraintes μ_1 et μ_2. Cette approximation est une technique de projection approchée qui consiste à introduire deux contraintes fixant les valeurs moyennes dans l'état fondamental de l'opérateur de symétrie et son carrée à leurs valeurs exactes. Elle peut être vue comme étant une transformation du référentiel du laboratoire à celui qui est intrinsèque pour le système en considération. Suivant la nature du problème étudié on définit le référentiel intrinsèque. Par exemple, dans le cas de la symétrie de translation on parle du référentiel du centre de masse et pour la cas de la symétrie nombre de particules on parle du référentiel en rotation dans l'espace de jauge et ainsi de suite. Comme nous l'avons déjà vu dans le chapitre sur la méthode SCRPA, les valeurs propres RPA peuvent être données par la relation suivante :

$$\omega = \frac{\langle [Q, [H', Q^\dagger]] \rangle}{\langle [Q, Q^\dagger] \rangle}. \tag{5.29}$$

Ces valeurs propres coïncident ainsi avec les énergies d'excitation intrinsèques du système c'est-à-dire les énergies d'excitation calculées dans le référentiel intrinsèque. Cependant, les valeurs propres corrigées (DS96), qui sont définies par :

$$\omega^c = \omega + \mu_1 \frac{\langle [Q, [\hat{N}, Q^\dagger]] \rangle}{\langle [Q, Q^\dagger] \rangle} + \mu_2 \frac{\langle [Q, [\hat{N}^2, Q^\dagger]] \rangle}{\langle [Q, Q^\dagger] \rangle}. \tag{5.30}$$

s'identifient avec les énergies d'excitation dans le référentiel du laboratoire. Suivant la relation (5.30), la correction consiste à faire l'opération inverse et ramener l'étude du référentiel intrinsèque au référentiel du laboratoire.

5.2.7 Nombre d'occupation

Suivant la méthode décrite dans le cadre du modèle à deux niveaux, les quantités $\hat{N}_q$ et $\hat{N}_q^2$ sont facilement obtenues en fonction des opérateurs $P^\dagger$ et P. Ainsi, dans le cas de ce modèle, à partir de (2.92) et (2.93) on peut écrire :

$$\hat{N}_q = 2P^\dagger P + \frac{2}{(\Omega-1)} {P^\dagger}^2 P^2 + \frac{4}{(\Omega-1)(\Omega-2)} {P^\dagger}^3 P^3 + \cdots, \tag{5.31a}$$

$$\hat{N}_q^2 = 4P^\dagger P + \frac{4(\Omega+1)}{(\Omega-1)} {P^\dagger}^2 P^2 + \frac{8(\Omega+1)}{(\Omega-1)(\Omega-2)} {P^\dagger}^3 P^3 + \cdots. \tag{5.31b}$$

A la lecture des équations (5.31a) et (5.31b), on remarque qu'a chaque ordre du développement, il existe la relation suivante :

$$\hat{N}_q^2 = 2(\Omega+1)\hat{N}_q - 4\Omega P^\dagger P. \tag{5.32}$$

On peut noter que l'équation (5.32) n'est autre que la relation de Casimir pour le système de quasi-spin car elle peut aussi se mettre sous la forme connue suivante :

$$\frac{\Omega}{2}(P^\dagger P + P P^\dagger) + (\frac{\hat{N}_q - \Omega}{2})^2 = \frac{\Omega}{2}(\frac{\Omega}{2} + 1). \tag{5.33}$$

En utilisant (5.19) et (5.17) les valeurs moyennes $\langle \hat{N}_q \rangle$ et $\langle \hat{N}_q^2 \rangle$ sont facilement calculées. Ainsi, le système d'équations SCQRPA est fermé et on peut commencer sa résolution. Cependant, on doit mentionner que, grâce à la simplicité de ce modèle, on peut aussi calculer les valeurs moyennes dans le vide RPA des nombres d'occupation des quasi-particules en utilisant l'état fondamental RPA. Par analogie avec le cas à deux niveaux dans la phase normale, l'état fondamental RPA dans le modèle de la séniorité est donné par :

$$|\mathrm{RPA}\rangle = \sum_{n=0}^{\Omega/2} \alpha_n Z^n {P^\dagger}^{2n} |-\rangle, \text{ avec } Z = \frac{Y}{X} \tag{5.34}$$

où les coefficients α_n sont donnés par :

$$\alpha_n = \frac{\Omega^n(\Omega+1)}{2^n n! \prod_{p=0}^{n}(\Omega - 2p + 1)}. \tag{5.35}$$

Par suite, on peut obtenir le résultat pour la valeur moyenne du nombre d'occupation de quasi-particules dans l'état RPA :

$$\langle \hat{N}_q \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=0}^{\Omega/2} \frac{(\Omega+1)^2 \Omega! (2n)! 4n}{(\Omega-2n)!(2^n n! \prod_{p=0}^{n}(\Omega-2p+1))^2} Z^{2n}. \tag{5.36}$$

$\mathcal{N}$ est la norme de l'état $|\mathrm{RPA}\rangle$ qui est donnée par :

$$\mathcal{N} = \langle \mathrm{RPA}|\mathrm{RPA}\rangle = \sum_{n=0}^{\Omega/2} \frac{(\Omega+1)^2 \Omega! (2n)!}{(\Omega-2n)!(2^n n! \prod_{p=0}^{n}(\Omega-2p+1))^2} Z^{2n}. \tag{5.37}$$

Pour la quantité $\hat{N}_q^2$ on peut utiliser soit la relation exacte de Casimir (5.33), soit l'état RPA ; dans ce dernier cas elle a la forme suivante :

$$\langle \hat{N}_q^2 \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=0}^{\Omega/2} \frac{(\Omega+1)^2 \Omega! (2n)! (4n)^2}{(\Omega-2n)! (2^n n! \prod_{p=0}^{n} (\Omega-2p+1))^2} Z^{2n}. \tag{5.38}$$

Avec ces dernières relations, le système d'équations SCRPA est fermé.

Ainsi, on a un système d'équations non linéaire constitué des équations RPA, des équations du champ moyen généralisé et des équations du nombre de particules qui sont toutes fonctions des amplitudes RPA. Il suffit donc de choisir des amplitudes RPA d'essai, pour commencer le calcul.

5.3 Résultats et discussion

Nous arrivons maintenant à la partie la plus intéressante de notre application de la méthode SCQRPA au modèle de la séniorité. Tout d'abord nous allons présenter et analyser les résultats de la méthode SCQRPA[1], c'est-à-dire avec une seule contrainte, où nous envisageons comparer nos résultats avec ceux de Dukelsky et Schuck (DS96). Ensuite, nous étudierons et nous analyserons en détail les résultats obtenus en utilisant la nouvelle version SCQRPA[2] de la méthode SCQRPA, c'est-à-dire la méthode SCQRPA avec deux contraintes. Nous montrerons que cette version améliore nettement les résultats pour toutes les observables. Il s'est de plus avéré que la méthode SCQRPA avec deux contraintes donne le résultat exact.

5.3.1 Cas de la méthode SCQRPA avec une contrainte

Nous rappelons que lors de l'établissement du système d'équations SCQRPA, nous avons utilisé la formulation avec deux contraintes. Ainsi, pour obtenir le système d'équations SCQRPA[1] il suffit d'imposer à la deuxième contrainte μ_2 d'être nulle dans toutes les équations. Tout comme dans le modèle de pairing à deux niveaux, pour résoudre les équations SCQRPA, nous avons utilisé la diagonalisation itérative. Cependant, dans le cas présent, il s'est avéré plus commode de changer le rôle des équations de champ moyen généralisé (5.26) et du nombre de particules (5.39). D'habitude, à partir des équations du champ moyen généralisé (5.26) on obtient les amplitudes u, v et à l'aide de l'équation du nombre de particules :

$$N = \langle \hat{N} \rangle = (u^2 - v^2) \langle \hat{N}_q \rangle + 2\Omega v^2. \tag{5.39}$$

on détermine la valeur de la contrainte μ_1, qui s'identifie au potentiel chimique. En effet, de l'équation (5.39) nous calculons v^2 comme suit :

$$v^2 = \frac{N - \langle \hat{N}_q \rangle}{2(\Omega - \langle \hat{N}_q \rangle)}, \tag{5.40}$$

et de l'équation de champ moyen généralisé (5.26) nous obtenons l'expression suivante pour la contrainte μ_1 :

$$\mu_1 = g \Bigg\{ -\frac{1}{2}\Big(\Omega(u^2-v^2) + 2v^2\Big) + (u^2-v^2)(XY+Y^2) + \frac{1}{2}(u^2-v^2)\frac{\langle \hat{N}_q \rangle - \frac{\langle \hat{N}_q^2 \rangle}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_q \rangle}{\Omega}}) \Bigg\}. \tag{5.41}$$

Par conséquent, nous pouvons effectuer la diagonalisation itérative facilement, et toutes les relations à respectés sont satisfaites simultanément. Nous sommes ainsi, en mesure de calculer toutes les observables nécessaires à mener notre étude. Nous aborderons maintenant l'exploitation des résultats. Nous commençons par l'énergie fondamentale du système. Sur la figure (5.1) nous représentons la comparaison entre le résultat de la différence entre l'énergie fondamentale SCQRPA et exacte et celui de la différence entre l'énergie fondamentale BCS et exacte. Nous remarquons que la méthode SCQRPA présente une amélioration importante par rapport à la méthode BCS. Nous

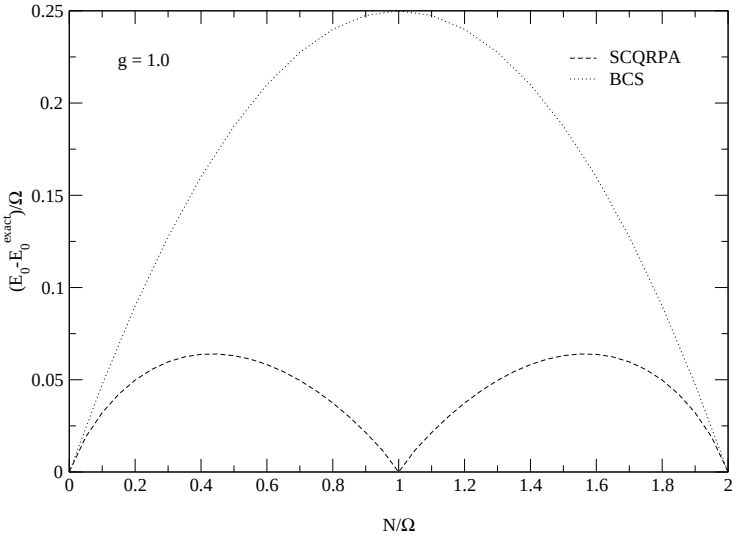

FIG. 5.1 – Différence entre les énergies fondamentales approximée et exacte en fonction du remplissage de la couche et pour une constante de couplage $g = 1.0$.

notons aussi que, contrairement à la méthode BCS, lorsque la couche est semi-remplie l'énergie fondamentale SCQRPA devient égale à l'énergie fondamentale exacte. Considérons maintenant la figure (5.2) qui représente la comparaison entre la variance du nombre de particules obtenue à l'aide de notre méthode avec celle obtenue par la méthode BCS. Nous remarquons que les résultats de la variance sont très similaires à ceux concernant l'énergie fondamentale. Cela ainsi montre que les fluctuations du nombre de particules dans la SCQRPA sont nettement plus faibles que celles de la méthode BCS. De plus, comme pour l'énergie fondamentale, à mi-remplissage de la couche, les fluctuations présentes la valeur exacte elles sont identiquement nulle.

Venons en maintenant à l'étude du mode mou. Nous remarquons sur la figure (5.3) que la valeur propre non corrigée de la méthode SCQRPA, qui représente une énergie d'excitation intrinsèque du système, s'identifie à deux fois la différence des potentiels chimiques : $2(\mu^+ - \mu^-) = E_0^{N+2} + E_0^{N-2} - 2E_0^N$. Cependant, la valeur propre corrigée ω^c, qui est donnée par :

$$\omega^c = \omega + 2\mu_1(u^2 - v^2)(X^2 + Y^2), \tag{5.42}$$

correspond à l'énergie d'excitation dans le laboratoire. Elle représente les différences entre les niveaux rotationnels successifs dans l'espace de jauge. De plus, nous constatons que lorsque la couche est semi-remplie, la valeur propre corrigée et non corrigée sont nulles. Ce résultat est très important puisqu'il montre que pour cette configuration, la SCQRPA est exacte. Dans le cas de mi-remplissage, nous obtenons un mode de Goldstone. Afin de confirmer ces résultats nous allons maintenant représenter la valeur propre corrigée et non corrigée en fonction de la constante de couplage g. En effet, nous avons choisi une couche dont la dégénérescence totale est égale à $2\Omega = 24$ et nous avons considéré les configurations suivante $N = 2, 10, 14, 22$. Sur les figures (5.4), (5.7), (5.5) et (5.6) nous représentons les résultats correspondants à ces configurations. Sur les figures (5.4) et (5.5) où le remplissage de la couche N/Ω est inférieur à l'unité, nous remarquons que l'énergie d'excitation intrinsèque suive étroitement la différence des potentiels chimiques $2(\mu^+ - \mu^-)$, alors que l'énergie d'excitation dans le laboratoire correspond à $2\mu^+ = E_0^{N+2} - E_0^N$. Nous rappelons que nous analysons des grandeurs physiques de faibles amplitudes à savoir des valeurs propres de basse énergie. Par conséquent, nous pouvons affirmer que l'identification de la valeur propre corrigée est assez bonne. Cette valeur représente la différence entre les niveaux rotationnels successifs (états de

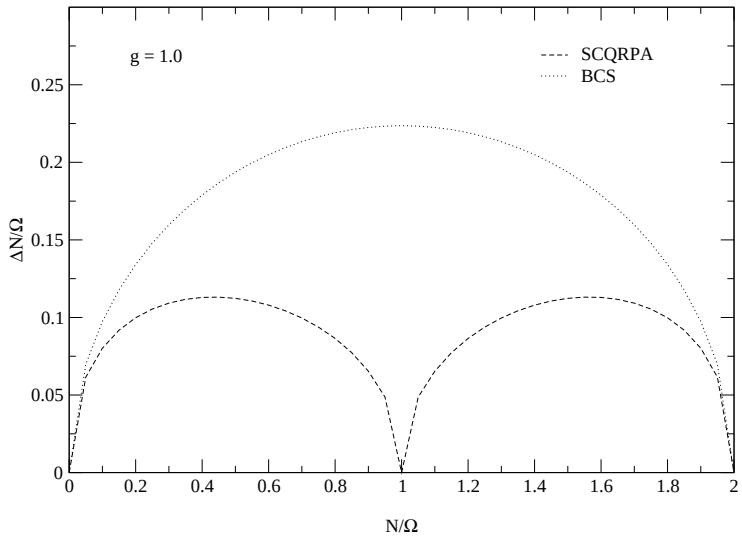

FIG. 5.2 – La variance du nombre de particules SCQRPA et BCS en fonction du remplissage de la couche et pour une constante de couplage $g = 1.0$.

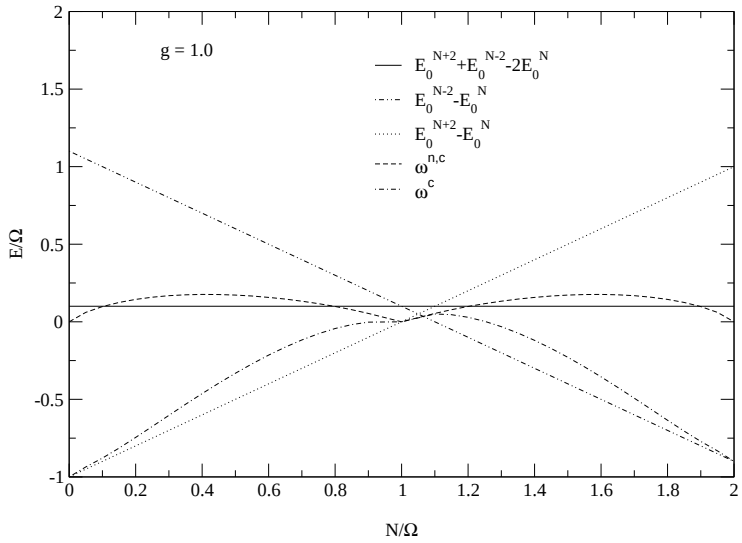

FIG. 5.3 – Energies d'excitations SCQRPA en fonction du remplissage de la couche et pour une constante de couplage $g = 1.0$.

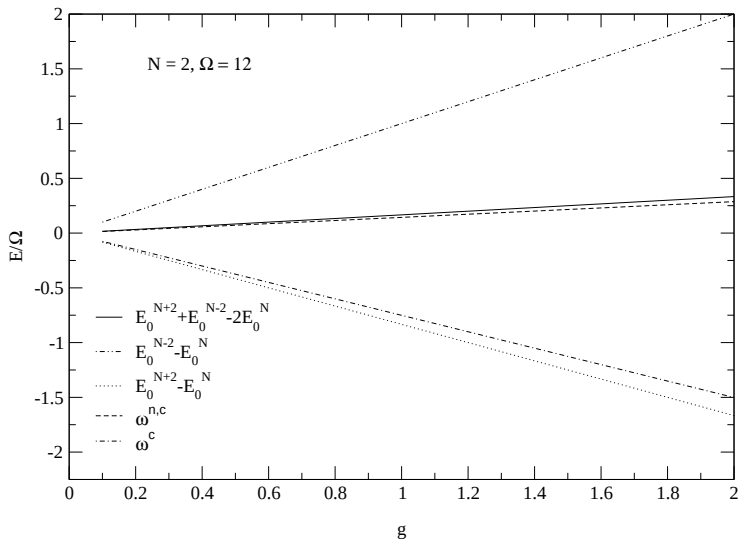

FIG. 5.4 – Energies d'excitation exactes et SCQRPA en fonction de la constante de couplage g, pour un nombre de particule $N = 2$.

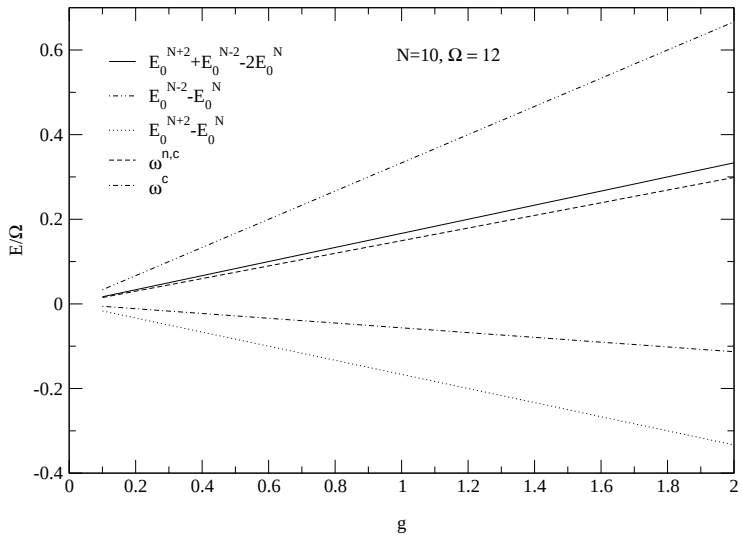

FIG. 5.5 – Même quantités que la figure (5.4), pour $N = 10$

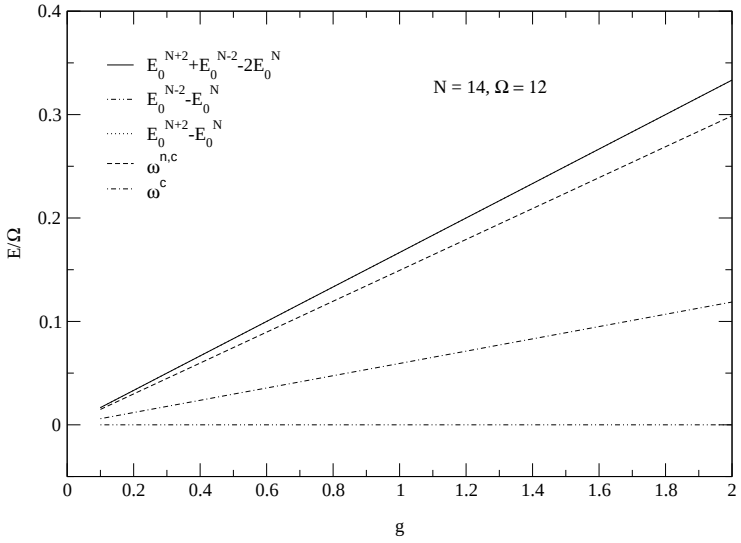

FIG. 5.6 – Même quantités que la figure (5.4), pour $N = 14$

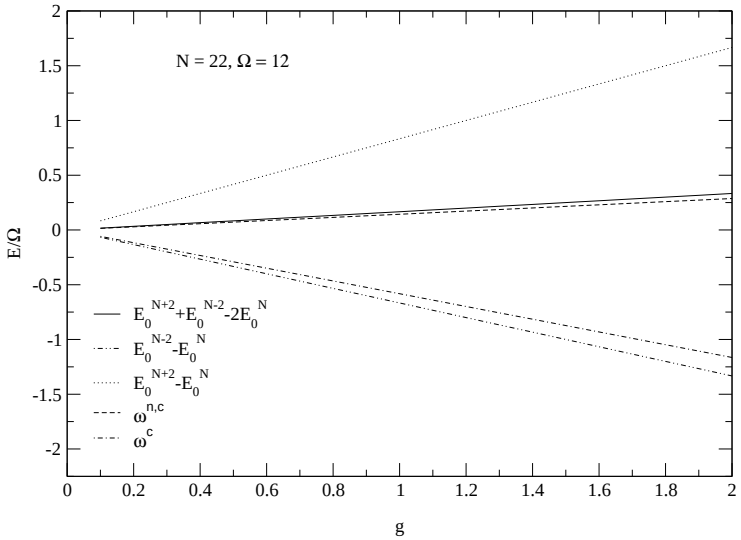

FIG. 5.7 – Même quantités que la figure (5.4), pour $N = 22$

particules) dans l'espace de jauge. Sur les figures (5.6) et (5.7) où le remplissage de la couche N/Ω est supérieur à l'unité, nous remarquons que l'énergie d'excitation intrinsèque s'identifie toujours à $2(\mu^+ - \mu^-)$, cependant, la valeur propre corrigée s'identifie ici à $-2\mu^- = E_0^{N-2} - E_0^N$. Cette valeur représente la différence entre les niveaux rotationnels successifs (états de trous) dans l'espace de jauge.

5.3.2 Cas de la méthode SCQRPA avec deux contraintes

Généralement, dans la méthode SCQRPA, tout comme dans le modèle de pairing à deux niveaux, la méthode de résolution la plus pratique est la diagonalisation itérative. Cependant, puisqu'il a été introduit une deuxième contrainte dans le Hamiltonien du modèle, nous avons remarqué qu'il est plus commode de ramener le problème à la résolution d'une équation non linéaire sur une seule variable Y. D'habitude, à partir des équations SCQRPA (5.22) on détermine les amplitudes RPA, X, Y et à partir des équations du champ moyen généralisé (5.26) on obtient les amplitudes u, v. Les deux contraintes, quant à elles sont déterminées à partir des équations liées à la conservation du nombre de particules. Par conséquent, puisque la contrainte μ_1 s'identifie au potentiel chimique, elle doit être donc obtenue à partir de l'équation du nombre de particules :

$$N = \langle \hat{N} \rangle = (u^2 - v^2)\langle \hat{N}_q \rangle + 2\Omega v^2. \tag{5.43}$$

En principe, de la même manière la contrainte μ_2 doit être déterminée à partir de l'équation du carré du nombre de particules donnée par :

$$\begin{aligned} N^2 &= \langle \hat{N}^2 \rangle = (u^2 - v^2)^2 \langle \hat{N}_q^2 \rangle + 8\Omega u^2 v^2 (1 - \frac{\langle \hat{N}_q \rangle}{\Omega})(XY + Y^2) + 4\Omega v^2 (u^2 + \Omega v^2) \\ &+ 4v^2(\Omega(u^2 - v^2) - u^2)\langle \hat{N}_q \rangle. \end{aligned} \tag{5.44}$$

Cependant, dans le cas présent, il s'est avéré plus commode de changer le rôle des équations de champ moyen et des équations du nombre de particules. On rappele que les équations SCQRPA peuvent être interprétées comme étant des équations de champ moyen d'un gaz de fluctuations quantiques de paires. Puisque les équations du nombre de particules (5.43) et (5.44) sont indépendantes des multiplicateurs de Lagrange, elles permettent de déterminer v et Y comme des fonctions du nombre de particules N. Ainsi, à partir de l'équation (5.44) nous obtenons une équation non linéaire en Y et comme précédemment, à partir de l'équation (5.43) on peut calculer v^2.

Inversement, les deux équations de champ moyen qui sont linéaires en μ_1 et μ_2, nous permettent immédiatement de déterminer les deux contraintes. Ainsi, à partir de l'équation de champ moyen (5.26) on peut obtenir l'expression suivante pour la contrainte μ_1 :

$$\mu_1 = (g - 4\mu_2)\Big\{(\Omega - 1)v^2 + (1 - 2v^2)(XY + Y^2 + \frac{1}{2}\frac{\langle \hat{N}_q \rangle - \frac{\langle \hat{N}_q^2 \rangle}{\Omega}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_q \rangle}{\Omega}})\Big\} - \frac{g}{2}\Omega - 2\mu_2. \tag{5.45}$$

Cette expression peut énormément simplifier les équations SCQRPA, c'est pour cela que nous allons d'abord réécrire les équations SCQRPA sous une forme plus simplifier. Par conséquent, en tenant compte de la condition de normalisation (5.7) des amplitudes de champ moyen u et v et remplaçant μ_1 par son expression dans les expressions des éléments de la matrices RPA (5.23) et (5.24) on obtient :

$$\begin{aligned} A &= 2(g - 4\mu_2)\Big\{(2v^2(1 - v^2) - 1)XY \\ &- v^2(1 - v^2)(1 + 2Y^2 - \Omega\frac{1 - 2\frac{\langle \hat{N}_q \rangle}{\Omega} + \frac{\langle \hat{N}_q^2 \rangle}{\Omega^2}}{1 - \frac{\langle \hat{N}_q \rangle}{\Omega}})\Big\}, \\ B &= 2(g - 4\mu_2)\Big\{(6v^2(v^2 - 1) + 1)XY \end{aligned} \tag{5.46}$$

$$- \quad v^2(1-v^2)(1+2Y^2-\Omega\frac{1-2\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}+\frac{\langle\hat{N}_q^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}})\Big\}. \tag{5.47}$$

De plus, en tenant compte de la condition de normalisation des états excités RPA, $X^2 - Y^2 = 1$, on peut déduire que l'équation (5.22) est équivalente à :

$$2AXY + B(X^2 + Y^2) = 0. \tag{5.48}$$

Ainsi, en utilisant le fait que l'on peut écrire $A = (g - 4\mu_2)A_0$ et $B = (g - 4\mu_2)B_0$, avec :

$$\begin{aligned} A_0 &= \Big\{(2v^2(1-v^2)-1)XY - v^2(1-v^2)(1+2Y^2-\Omega\frac{1-2\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}+\frac{\langle\hat{N}_q^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}})\Big\}, \\ B_0 &= \Big\{(6v^2(v^2-1)+1)XY - v^2(1-v^2)(1+2Y^2-\Omega\frac{1-2\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}+\frac{\langle\hat{N}_q^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}})\Big\} \end{aligned} \tag{5.49}$$

on peut transformer l'équation (5.48) sous la forme suivante :

$$(g - 4\mu_2)(2A_0XY + B_0(X^2 + Y^2)) = 0. \tag{5.50}$$

Puisqu'on travaille dans la phase superfluide, on a toujours $v \neq 0$ et $X \neq Y \neq 0$ ce qui prouve que $(2A_0XY + B_0(X^2 + Y^2)) \neq 0$. Par conséquent, on peut déduire l'expression suivante pour la deuxième contrainte μ_2 :

$$\mu_2 = \frac{g}{4} \tag{5.51}$$

qui est une valeur indépendante du nombre de particule N. Considérant l'équation (5.6), on peut montrer à partir de $\mu_2 = \dfrac{\partial E_0}{\partial N^2}$ que (5.51) donne la valeur exacte de la deuxième contrainte. De plus, en remplaçant μ_2 par son expression dans l'équation (5.45) on peut obtenir le résultat suivante pour le potentiel chimique μ_1 :

$$\mu_1 = -\frac{g}{2}(\Omega + 1) \tag{5.52}$$

qui est aussi la valeur exacte du potentiel chimique. De plus, tenant compte de la relation (5.51), à partir de (5.46) et (5.47) on montre que $A = B = 0$ et puisque la valeur propre RPA est donnée par $\sqrt{A^2 - B^2}$ celle-ci demeure toujours nulle : $\omega = 0$. Cela signifie que dans la méthode SCQRPA^2, comme dans la méthode QRPA on obtient un mode de Goldstone. En physique nucléaire ce mode est d'habitude appelé mode spurieux (RS80). Ce résultat est très important puisqu'il signifie que la symétrie du nombre de particules est totalement restaurée. En fait, il est bien connu que, la restauration du bon nombre de particules dans ce modèle implique que le modèle est soluble exactement (RS80). En effet, on a déjà vu que l'on a obtenu les valeurs exactes pour les deux contraintes μ_1 and μ_2.

Nous allons maintenant montrer qu'on obtient aussi la valeur exacte de l'énergie de l'état fondamental (et donc pour la bande entière des états fondamontaux). En partant de la valeur moyenne du Hamiltonien H en représentation des quasi-particules et en utilisant les relations (5.19) et (5.17), on peut écrire :

$$\begin{aligned} E_{SCQRPA} &= \langle H\rangle \\ &= -g\Omega(\Omega(1-v^2)v^2 + v^4) + g\Omega(2(1-v^2)v^2 + \frac{v^4}{\Omega})\langle\hat{N}_q\rangle - g(1-v^2)v^2\langle\hat{N}_q^2\rangle \\ &- g\Omega((1-v^2)^2 + v^4)Y^2(1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}) + 2g\Omega(1-v^2)v^2XY(1-\frac{\langle\hat{N}_q\rangle}{\Omega}) \\ &= -g\Omega v^2(\Omega + (1-\Omega)v^2) - gY^2(\Omega - \langle\hat{N}_q\rangle) + 2g\Omega(1-v^2)v^2(XY + Y^2) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \quad \left\{2g\Omega v^2 - 2g\Omega v^4 + gv^4 - 2g(1-v^2)v^2(XY+Y^2)\right\}\langle \hat{N}_q\rangle \\
&- \quad g(1-v^2)v^2\langle \hat{N}_q^2\rangle, \qquad (5.53)
\end{aligned}
$$

Tenant compte de la relation de Casimir (5.32), on peut remplacer $Y^2(\Omega - \langle \hat{N}_q\rangle)$ par $2(\Omega+1)\langle \hat{N}_q\rangle - \langle \hat{N}_q^2\rangle$ dans le terme $gY^2(\Omega - \langle \hat{N}_q\rangle)$; on obtient alors :

$$
\begin{aligned}
E_{SCQRPA} &= -\frac{g}{2}(\Omega+1)\{(1-2v^2)\langle \hat{N}_q\rangle + 2\Omega v^2\} + \frac{g}{4}\Big\{(1-2v^2)^2\langle \hat{N}_q^2\rangle \\
&+ \left(4v^2(\Omega(1-2v^2) - 1 + v^2) - 8(1-v^2)v^2(XY+Y^2)\right)\langle \hat{N}_q\rangle \\
&+ 8\Omega(1-v^2)v^2(XY+Y^2) + 4\Omega v^2(1-v^2+\Omega v^2)\Big\}. \qquad (5.54)
\end{aligned}
$$

Finalement, utilisons les expressions de N et N^2 données par les équations (5.43) et (5.44) on obtient :

$$
E_{SCQRPA} = -\frac{g}{2}(\Omega+1)N + \frac{g}{4}N^2 \qquad (5.55)
$$

ce qui est bien l'énergie fondamentale exacte donnée par l'équation (5.6). L'énergie d'excitation dans le référentiel du laboratoire est donnée par l'expression suivante :

$$
\begin{aligned}
\omega^c &= \omega + 2\mu_1(u^2-v^2)(X^2+Y^2) + \mu_2\Bigg\{\Bigg(8v^2(\Omega(u^2-v^2)-u^2) - 16u^2v^2XY \\
&+ 4(u^2-v^2)^2\left(X^2+Y^2+\frac{\langle \hat{N}_q\rangle - \frac{\langle \hat{N}_q^2\rangle}{\Omega}}{1-\frac{\langle \hat{N}_q\rangle}{\Omega}}\right) - 8\Omega u^2v^2\left(\frac{2Y^2}{\Omega}\right. \\
&- \left.\frac{1-\frac{\langle \hat{N}_q\rangle}{\Omega} - \frac{\langle \hat{N}_q^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle \hat{N}_q\rangle}{\Omega}}\right)(X^2+Y^2)\Bigg) - 16XY\Bigg(\left(2u^2v^2 - (u^2-v^2)^2\right)XY \\
&+ \Omega u^2v^2\left(\frac{X^2+Y^2}{\Omega} - \frac{1-\frac{\langle \hat{N}_q\rangle}{\Omega} - \frac{\langle \hat{N}_q^2\rangle}{\Omega^2}}{1-\frac{\langle \hat{N}_q\rangle}{\Omega}}\right)\Bigg)\Bigg\}, \qquad (5.56)
\end{aligned}
$$

En résumé, pour un choix donné du nombre de particules N, de la dégénérescence 2Ω et du couplage g, nous partons d'une amplitude RPA d'essai Y puis nous calculons $\langle \hat{N}_q\rangle$ et $\langle \hat{N}_q^2\rangle$, v^2 et enfin nous résolvons l'équation (5.44). Tant que l'équation (5.44) admet une solution, le modèle est toujours exactement soluble. Néanmoins, il est intéressant de noter que le résultat de l'énergie d'excitation dans le laboratoire, c'est-à-dire la valeur propre corrigée de la méthode SCQRPA avec deux contraintes n'est pas exact. Sur la figure (5.8) où nous représentons la valeur propre corrigée et non corrigée de la méthode SCQRPA^2, nous pouvons remarquer ce résultat. Ainsi, nous pouvons conclure que la méthode SCQRPA avec deux contraintes fournit la solution exacte sauf pour l'énergie d'excitation dans le laboratoire. En fait, cela n'est pas une surprise, puisqu'on peut calculer la valeur moyenne sur l'état fondamental du cube de l'opérateur nombre de particules et nous obtenons une figure similaire aux figures (5.1) et (5.2) dans le cas de la SCQRPA avec une contrainte. En fait, cela montre que la fonction d'onde RPA n'est pas exacte. Ainsi, nous pouvons conclure que la méthode SCQRPA avec deux contraintes permet de retrouver, presque, toutes les observables calculées dans ce modèle. Par rapport à la SCQRPA avec une contrainte, nous avons pu obtenir l'énergie d'excitation intrinsèque exacte, l'énergie fondamentale exacte, les valeurs exactes des deux contraintes et nous avons aussi pu éliminer les fluctuations du nombre de particules. Seul l'état fondamental RPA n'est pas exact et ainsi nécessite encore des études.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons réalisé une extension de la méthode SCQRPA permettant d'éliminer complètement les fluctuations du nombre de particules. En fait, grâce à la souplesse

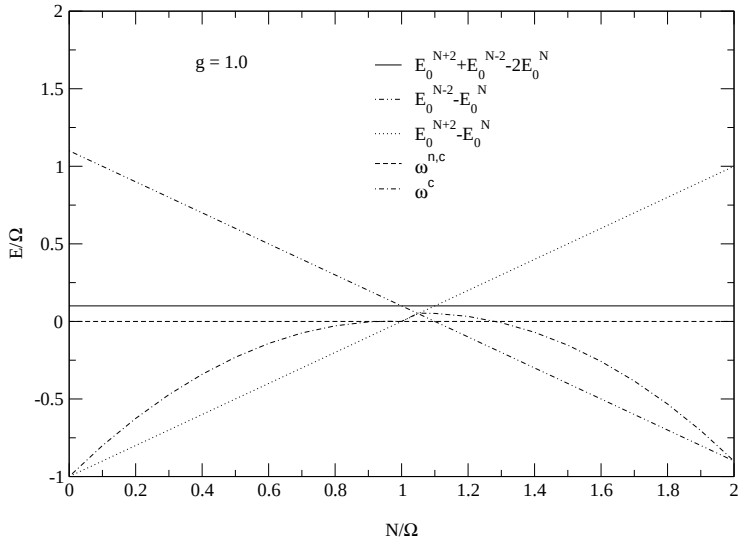

FIG. 5.8 – Energies d'excitations SCQRPA^2 en fonction du remplissage de la couche et pour une constante de couplage $g = 1.0$.

de notre méthode, nous avons pu introduire une deuxième contrainte permettant de fixer la valeur moyenne dans l'état fondamental RPA du carré de l'opérateur nombre total de particules à sa valeur exacte. Nous avons appliqué cette extension de la méthode SCQRPA dans le cas du modèle de la séniorité et nous avons obtenus de très bons résultats. Nous signalons que ce modèle peut être vu comme un cas particulier du modèle d'appariement à deux niveaux. En ce qui concerne l'énergie du fondamental et en comparaison avec la méthode BCS, nous avons remarqué que la SCQRPA avec une seule contrainte fournit de très bons résultats. De plus, dans le cas symétrique où la couche est semi-remplie, la méthode SCQRPA, contrairement à la méthode BCS, devient exacte. Toujours avec une seule contrainte, nous avons remarqué que la valeur propre de basse énergie non corrigée de la méthode SCQRPA représente une énergie d'excitation du système intrinsèque, alors que, celle corrigée correspond à l'énergie d'excitation dans le laboratoire. Elle représente les différences entre les niveaux rotationnels successives dans l'espace de jauge. Bien que, la méthode SCQRPA avec une seule contrainte ait donné des très bons résultats, l'introduction de la deuxième contrainte a encore amélioré ces résultats. En fait, en introduisant la deuxième contrainte nous avons obtenu l'énergie fondamentale exacte et le potentiel chimique exact.

De plus, nous avons obtenu pour la valeur propre de la SCQRPA la valeur nulle, c'est-à-dire un mode de Goldstone parfait. Ceci n'est cependant pas une surprise parce que l'énergie exacte du fondamental étant un polynôme d'ordre deux en N, il est clair qu'en imposant $\langle \hat{N}^2 \rangle = N^2$ on vas reproduire le résultat exact.

Troisième partie

Modèle de Da-Providencia et Schütte

Introduction

Dans cette partie nous envisageons d'appliquer la méthode SCRPA à un modèle schématique de la théorie des champs. Ce modèle décrit d'une manière simple le couplage des fermions à un champ de boson scalaire. Le terme de couplage dans le Hamiltonien de ce modèle est choisi de telle façon qu'une transition à une phase de symétrie brisée, de type Nambu-Goldstone, soit possible ; cela nous permet ainsi d'étudier la condensation des bosons. Ce modèle qui porte le nom de modèle de Da-Providencia et Schütte (SD77) est exactement soluble. Il a déjà servi pour tester les approximations introduites dans les problèmes à N corps, comme, par exemple, les méthodes RPA standard, HF et BCS. Par conséquent, il constitue un bon candidat pour tester la méthode SCRPA. La première application de la méthode SCRPA à ce modèle été réalisée par Bertrand *et al.* (BSC$^+$01). Ils ont obtenu de bons résultats concernant, presque, toutes les propriétés physiques du modèle. Cependant, à cause de la brisure artificielle de symétrie dans ce modèle, il y avait un problème concernant le mode spurieux. Ce problème est lié au fait que dans la méthode SCRPA nous obtenons une valeur propre qui ne correspond pas à une énergie d'excitation du système, contrairement à la méthode RPA standard qui donne un mode de Goldstone. En réalité, nous devons obtenir une énergie d'excitation du système parce que le système est fini et parce que, en fait, la symétrie est artificiellement brisée. Dans la méthode RPA standard nous obtenons, au contraire, un mode de Goldstone puisqu'elle simule le cas d'un système infini. Dans cette partie nous envisageons d'étudier ce problème en détail.

Chapitre 1

Présentation du modèle

Le modèle est composé de deux niveaux notés 0 pour le niveau inférieur et 1 pour le niveau supérieur. Chaque niveau est dégénéré k fois, où $k = 1, \ldots, N$. Les opérateurs de création et d'annihilation appartenant au niveau supérieur sont notés respectivement $a^\dagger_{1k}$ et a_{1k} ; ceux du niveau inférieur $a^\dagger_{0k}$ et a_{0k}. Ce modèle constitue une extension du modèle de Lipkin à deux niveaux pour inclure un couplage à un champ bosonique représenté par les opérateurs $b^\dagger$ et b, ayant pour force de couplage α. Le Hamiltonien du modèle est donné par :

$$H = \bar{n} + \alpha b^\dagger b + G(\tau^+ b^\dagger + \tau^- b) \tag{1.1}$$

où G représente la force d'interaction fermion-boson ; τ^+ et τ^- (avec τ^0) sont les opérateurs de quasi-spin du modèle de Lipkin. Ils sont exprimés en fonction des opérateurs fermioniques des deux couches de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \tau^+ &= \sum_i a^\dagger_{1i} a_{0i},\ \tau^- = \sum_i a^\dagger_{0i} a_{1i} \\ \tau^0 &= \frac{1}{2}(\bar{n} - n) \end{aligned} \tag{1.2}$$

où

$$n = \sum_i a^\dagger_{0i} a_{0i}, \quad \bar{n} = \sum_i a^\dagger_{1i} a_{1i} \tag{1.3}$$

sont respectivement les opérateurs nombre de trous et nombre de particules du système. Ainsi, le nombre total de particules est représenté par l'opérateur $\hat{N}$ donné par :

$$\hat{N} = n + \bar{n}. \tag{1.4}$$

Puisque les opérateurs τ^+, τ^- et τ^0 obéissent aux relations de commutation suivantes :

$$[\tau^+, \tau^-] = 2\tau^0 \quad \text{et} \quad [\tau^0, \tau^\pm] = \pm\tau^\pm, \tag{1.5}$$

ils constituent alors une algèbre $SU(2)$. Le Hamiltonien (1.1) constitue un modèle schématique de la théorie des champs car il décrit le couplage des fermions à un champ de boson scalaire. Le terme de couplage $(\tau^+ b^\dagger + \tau^- b)$ est choisi de telle manière que la transition à la phase de symétrie brisée, de type Nambu-Goldstone, soit possible. Pour étudier les transitions de phase qui peuvent se produire dans ce système, on introduit l'opérateur de symétrie P défini par :

$$P = b^\dagger b - \bar{n} \tag{1.6}$$

qui représente la différence entre le nombre de bosons et le nombre de fermions du niveau supérieur. Grâce au fait que le modèle satisfait une algèbre $SU(2)$, il est facile de trouver une base orthonormée dans laquelle la diagonalisation du Hamiltonien (1.1) est exacte. Cette base qui sous-tend

l'espace de Hilbert du modèle est donnée par :

$$|kl\rangle = \tau^{+^k} b^{\dagger^l} |\phi\rangle, \qquad 0 \leqslant k \leqslant N,\ l \geqslant 0 \tag{1.7}$$

où $|\phi\rangle$ est l'état non perturbé dans lequel tous les fermions se trouvent dans le niveau inférieur ; cet état est un déterminant de Slater donné par :

$$|\phi\rangle = \prod_{i=1}^{N} a_{0i}^{\dagger} |-\rangle, \tag{1.8}$$

et l'action des opérateurs de quasi-spin sur cet état est donnée par :

$$\tau^- |\phi\rangle = 0,\ \tau^0 |\phi\rangle = -\frac{N}{2} |\phi\rangle. \tag{1.9}$$

Dans cette base l'opérateur de symétrie P est diagonal et il agit de la manière suivante :

$$P|kl\rangle = (l-k)|kl\rangle. \tag{1.10}$$

La solubilité du modèle est une conséquence du fait que le Hamiltonien H commute avec l'opérateur de symétrie P de sorte que H est globalement invariant dans les sous-espaces propres de P :

$$U_L = \left\{ |k, k+L\rangle \right\}; \begin{cases} k = 0, \ldots, N; & \text{pour } L \geqslant 0 \\ k = -L, \ldots, N; & \text{pour } -N \leqslant L < 0. \end{cases} \tag{1.11}$$

U_L est un espace propre de P avec $P\psi = L\psi$, pour $\psi \in U_L$. Ainsi, dans une base orthonormalisée $|\phi_k\rangle = \dfrac{|k, k+L\rangle}{\sqrt{\langle k, k+L | k, k+L\rangle}}$ de U_L, les éléments de matrice non nuls du Hamiltonien H sont donnés par :

$$\begin{aligned} \langle \phi_k | H | \phi_k \rangle &= k + \alpha(k+L), \\ \langle \phi_{k+1} | H | \phi_k \rangle &= \langle \phi_k | H | \phi_{k+1} \rangle = G\sqrt{(k+1)(N-k)(k+L+1)}. \end{aligned} \tag{1.12}$$

Le problème aux valeurs propres de H se réduit donc à la diagonalisation d'une matrice de dimension $N+1$ pour $L \geqslant 0$ et de dimension $N+L+1$ pour $L < 0$.

1.1 Structure de la solution exacte de H

Comme conséquence de l'existence de l'opérateur de symétrie P, le spectre en énergie du Hamiltonien H peut être groupé en bandes comme les bandes rotationnelles du noyau. Nous représentons sur la figure (1.1) quelques unes des ces bandes : en particulier, celles qui donnent les énergies les plus basses pour chaque valeur propre de P et ceci pour des constantes de couplage réduite fixées :

$$x = G\sqrt{\frac{N}{\alpha}}. \tag{1.13}$$

L'énergie fondamentale absolue d'une bande est l'énergie la plus basse de toutes les énergies fondamentales de la bande. La structure en bande permet d'identifier les différentes phases du système qui dépendent directement de la symétrie. Par conséquent, si elle est spontanément brisée, le système se trouve en zone dite déformée, sinon il est en zone dite sphérique.

En analysant la figure (1.1), on remarque que pour $x \leqslant 1$ (c'est-à-dire les faibles valeurs de G ou de N et en gardant α constant), l'état fondamental absolu d'une bande correspond à la valeur $L = 0$ qui est la valeur propre de l'opérateur de symétrie P pour l'état fondamental non perturbé : c'est la région sphérique. *A contrario*, pour $x > 1$ l'état fondamental absolu ne correspond plus à

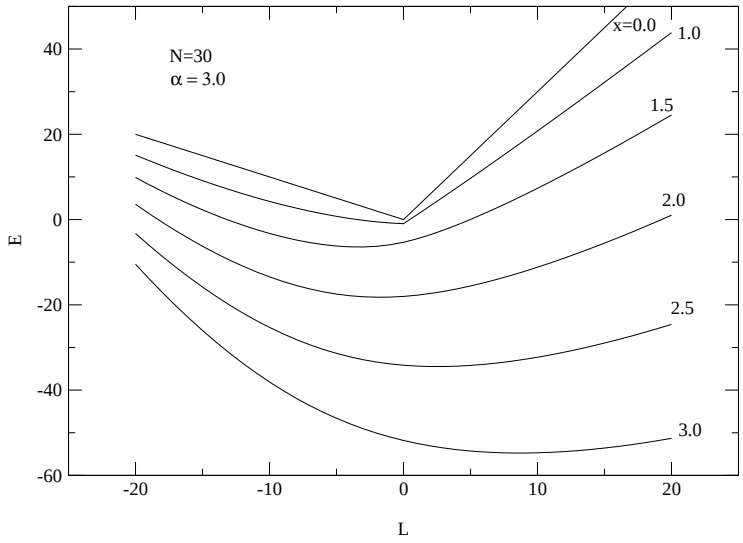

FIG. 1.1 – Bandes du spectre de l'énergie fondamentale avec $\alpha = 3$ et $N = 30$. Chaque bande correspond à un x différent.

la valeur $L = 0$ mais à des valeurs entières de L qui ne sont pas nulles. Le système est alors dans sa phase déformée. La nature de cette phase est différente suivant le signe de L. Pour $L > 0$ il y a une condensation de bosons et l'état fondamental absolu est "dominé" par $b^{\dagger^l}|\phi\rangle$ et pour $L < 0$ il y a une condensation de fermions (particule-trou) et dans ce cas l'état fondamental absolu est "dominé" par $\tau^{+^k}|\phi\rangle$.

Chapitre 2

RPA Self-consistante

2.1 Zone déformée

La zone déformée est la région où la symétrie P est brisée; elle est caractérisée par des valeurs de la constante de couplage réduite $x > 1$. En réalité, puisque le système est un système fini, la symétrie P n'est pas spontanément brisée; elle est plutôt artificiellement brisée de façon spontanée et pour comprendre les propriétés physiques du système, sa restauration est fondamentale. Rappelons d'abord que dans la référence (BSC$^+$01), Bertrand *et al.* ont déjà appliqué la méthode SCRPA à ce modèle dans ses deux phases sphérique et déformée. Ils ont utilisé un opérateur d'excitation RPA linéaire en boson. La méthode SCRPA donne de bons résultats par rapport à la RPA standard pour l'énergie du fondamental et aussi pour les énergies d'excitation dans les deux phases du modèle, et même à la transition de phase, où la RPA standard diverge. Il subsiste cependant un problème concernant le mode spurieux qui doit être encore approfondi. Il est bien connu que dans la méthode SCRPA, le mode spurieux est lié étroitement à l'opérateur d'excitation RPA. De plus son apparition (mode à énergie nulle) représente une signature de la restauration totale de la symétrie et par conséquent le théorème de Goldstone est satisfait. Dans la méthode SCRPA, ce problème du mode spurieux est résolu dans le cas du modèle de Lipkin à 3-niveaux, où la symétrie de rotation est spontanément brisée. Ceci est expliqué dans l'article de Delion *et al.* (DDS). Dans ce cas particulier, la résolution du problème du mode spurieux est liée au fait que l'opérateur d'excitation RPA utilisé dans le calcul SCRPA tient compte de la symétrie de rotation. Ces auteurs ont alors obtenu un mode mou (mode de Goldstone) et la symétrie est totalement restaurée. Or, dans le modèle de Da-Providencia et Schütte, l'opérateur d'excitation RPA choisie par Bertrand *et al.* (BSC$^+$01) ne tient compte que des termes linéaires en bosons alors que l'opérateur de symétrie P est quadratique en boson $B^\dagger B$. On pourrait donc penser inclure les termes de type $B^\dagger B$ dans l'opérateur RPA pour résoudre le problème. Mais ceci n'est pas envisageable car $B^\dagger B$ est hermitique. Il nous reste ainsi une seule possibilité : procéder comme pour l'opérateur d'excitation RPA de l'oscillateur anharmonique et inclure les termes de type $B^\dagger B^\dagger$ et BB. C'est cette idée que nous allons tester dans ce chapitre.

2.1.1 Fermions

Dans la zone déformée il est pertinent de faire la transformation des opérateurs fermioniques suivante :

$$\begin{aligned} \gamma^\dagger_{1k} &\equiv a^\dagger_{1k},\ \gamma_{1k} \equiv a_{1k}, \\ \gamma^\dagger_{0k} &\equiv a_{0k},\ \gamma_{0k} \equiv a^\dagger_{0k} \end{aligned} \tag{2.1}$$

Après cette transformation, les opérateurs de quasi-spin sont donnés par :

$$\begin{aligned} \tau^+ &= \sum_k \gamma^\dagger_{1k}\gamma^\dagger_{0k}, \quad \tau^- = \sum_k \gamma_{0k}\gamma_{1k} \\ \tau^0 &= \frac{1}{2}\sum_k (\gamma^\dagger_{1k}\gamma_{1k} + \gamma^\dagger_{0k}\gamma_{0k}) - \frac{N}{2} \end{aligned} \tag{2.2}$$

ils obéissent bien sûr toujours aux règles de commutation du moment cinétique. Nous effectuons une transformation de Bogoliubov sur les opérateurs de particules qui projette tout le problème dans l'espace des quasi-particules. Ce choix est justifié puisque la base dite déformée de Bogoliubov diagonalise une partie du Hamiltonien. A l'aide de la transformation de Bogoliubov, on peut exprimer les opérateurs quasi-particules comme suit :

$$\begin{aligned} \alpha_{0k} &= u\gamma_{0k} + v\gamma^\dagger_{1k} \\ \alpha^\dagger_{1k} &= u\gamma^\dagger_{1k} - v\gamma_{0k}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

avec $u^2 + v^2 = 1$. Nous travaillerons donc désormais dans cette nouvelle base où nous définissons les nouveaux quasi-spins :

$$\begin{aligned} T^+ &= \sum_k \alpha^\dagger_{1k}\alpha^\dagger_{0k}, \\ T^- &= \sum_k \alpha_{0k}\alpha_{1k} \\ T^0 &= \frac{1}{2}\sum_k (\alpha^\dagger_{1k}\alpha_{1k} + \alpha^\dagger_{0k}\alpha_{0k}) - \frac{N}{2} \end{aligned} \tag{2.4}$$

Par suite, on obtient l'expression des quasi-spins originaux :

$$\begin{aligned} \tau^+ &= -v^2T^- + u^2T^+ - 2uvT^0, \\ \tau^- &= u^2T^- - v^2T^+ - 2uvT^0, \\ \tau^0 &= uv(T^+ + T^-) + (u^2 - v^2)T^0 \end{aligned} \tag{2.5}$$

et les opérateurs nombre de particules et nombre de trous :

$$\begin{aligned} \bar{n} &= uv(T^+ + T^-) + (u^2 - v^2)T^0 + \frac{N}{2} \\ n &= -uv(T^+ + T^-) - (u^2 - v^2)T^0 + \frac{N}{2}. \end{aligned} \tag{2.6}$$

Ces opérateurs vérifient les mêmes règles de commutation que les quasi-spins originaux :

$$[T^+, T^-] = 2T^0, \quad [T^0, T^\pm] = \pm T^0 \tag{2.7}$$

2.1.2 Bosons

En ce qui concerne les opérateurs bosoniques, la procédure standard pour mettre en évidence la transition de phase (condensation des bosons) dans ce modèle consiste à introduire un condensat σ. Les opérateurs bosoniques sont alors donnés par :

$$b \to B + \sigma, \tag{2.8}$$

et on a bien sûr toujours la règle de commutation des bosons :

$$[B, B^\dagger] = 1 \tag{2.9}$$

2.1.3 Opérateur de symétrie

L'opérateur de symétrie P dans la base déformée est donné par :

$$P = P_0 + P_f + P_B \tag{2.10}$$

où

$$\begin{aligned} P_0 &= \sigma^2 - \frac{N}{2}, \\ P_f &= -uv(T^+ + T^-) - (u^2 - v^2)T^0, \\ P_B &= B^\dagger B + \sigma(B^\dagger + B). \end{aligned} \tag{2.11}$$

Également, nous pouvons exprimer le carré de l'opérateur de symétrie P dans la base déformée :

$$P^2 = P_0^2 + P_f^2 + P_B^2 + 2P_0P_f + 2P_0P_B + 2P_fP_B, \tag{2.12}$$

avec

$$\begin{aligned} P_0^2 &= \sigma^4 - \sigma^2 N + \frac{N^2}{4} \\ P_f^2 &= (u^2 - v^2)^2 T^{0^2} + u^2v^2(T^+T^+ + T^-T^- + 2T^+T^- - 2T^0) \\ &+ 2uv(u^2 - v^2)(T^+T^0 + T^0T^-) + uv(u^2 - v^2)(T^+ + T^-) \\ P_B^2 &= B^\dagger B^\dagger BB + 2\sigma(B^\dagger B^\dagger B + B^\dagger BB) + \sigma^2(B^\dagger B^\dagger + BB) \\ &+ (2\sigma^2 + 1)B^\dagger B + \sigma(B^\dagger + B) + \sigma^2 \\ 2P_0P_f &= -2(\sigma^2 - \frac{N}{2})(uv(T^+ + T^-) + (u^2 - v^2)T^0) \\ 2P_0P_B &= 2(\sigma^2 - \frac{N}{2})(B^\dagger B + \sigma(B^\dagger + B)) \\ 2P_fP_B &= -2(uv(T^+ + T^-) + (u^2 - v^2)T^0)B^\dagger B - 2\sigma(u^2 - v^2)(B^\dagger + B)T^0 \\ &- 2\sigma uv(T^+B^\dagger + T^+B + T^-B^\dagger + T^-B). \end{aligned}$$

Par conséquent, nous pouvons facilement calculer la variance défini par :

$$(\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 \tag{2.13}$$

où,

$$\begin{aligned} \langle P \rangle &= \sigma^2 - \frac{N}{2} - (u^2 - v^2)\langle T^0 \rangle + \langle B^\dagger B \rangle \\ \langle P^2 \rangle &= \sigma^4 + \sigma^2(1 - N) + \frac{N^2}{4} + (u^2 - v^2)^2\langle T^{0^2} \rangle + u^2v^2(\langle T^+T^+ \rangle + \langle T^-T^- \rangle + 2\langle T^+T^- \rangle - 2\langle T^0 \rangle) \\ &- 2(\sigma^2 - \frac{N}{2})(u^2 - v^2)\langle T^0 \rangle + \langle B^\dagger B^\dagger BB \rangle + \sigma^2(\langle B^\dagger B^\dagger \rangle + \langle BB \rangle) + (4\sigma^2 - N + 1)\langle B^\dagger B \rangle \\ &- 2(u^2 - v^2)\langle T^0B^\dagger B \rangle - 2\sigma uv(\langle T^+B^\dagger \rangle + \langle T^+B \rangle + \langle T^-B^\dagger \rangle + \langle T^-B \rangle). \end{aligned}$$

2.1.4 Hamiltonien

Dans la région déformée où la symétrie P est spontanément brisée, comme nous l'avons déjà expliqué précédemment, on introduit une contrainte qui fixe la valeur moyenne de cette symétrie à sa valeur exacte. Ainsi, dans la base déformée le Hamiltonien avec contrainte du modèle s'écrit :

$$H' = H - \mu P = E_0^{HF} + H_0^F + H_0^B + H_{int} \tag{2.14}$$

avec :

$$E_0^{HF} = \alpha\sigma^2 + 2NGuv\sigma - \frac{N}{2}(u^2 - v^2) - \mu(\sigma^2 - \frac{N}{2})$$

$$\begin{aligned} H_0^F &= \frac{N}{2} + (uv + \sigma G(u^2 - v^2)(T^+ + T^-) + (u^2 - v^2 - 4Guv\sigma)(T^0 + \frac{N}{2}) \\ &+ \mu(uv(T^+ + T^-) + T^0(u^2 - v^2)) \\ H_0^B &= \alpha B^\dagger B + (\alpha\sigma - 2uvGT^0)(B^\dagger + B) - \mu(B^\dagger B + \sigma(B^\dagger + B)) \\ H_{int} &= G\Big((u^2T^+ - v^2T^-)B^\dagger + (u^2T^- - v^2T^+)B\Big). \end{aligned} \tag{2.15}$$

De plus, dans cette région, l'énergie de l'état fondamental est donnée par :

$$E = \langle H \rangle = \langle H' \rangle + \mu \langle P \rangle. \tag{2.16}$$

2.1.5 Opérateur d'excitation RPA

Nous rappelons que la méthode SCRPA a été déjà appliquée dans ce modèle par Bertrand *et al.* (BSC$^+$01). L'opérateur d'excitation RPA a été construit à partir des opérateurs d'excitations t^+, t^- et $B^\dagger$, B comme suit :

$$Q_\nu^\dagger = X_\nu t^+ - Y_\nu t^- + \lambda_\nu B^\dagger - \mu_\nu B, \quad \nu = 1, 2 \tag{2.17}$$

où les opérateurs $t^\pm$ sont donnés par :

$$t^\pm = \frac{T^\pm}{\sqrt{-2\langle T^0 \rangle}}. \tag{2.18}$$

Avec ce choix d'opérateur d'excitation Bertrand *et al.* (BSC$^+$01) ont trouvé de très bons résultats pour l'énergie du fondamental, le potentiel chimique, et l'un des deux modes d'excitation RPA, à savoir le mode du premier état excité Ω_2. Il subsiste cependant le problème du mode spurieux qui montre que la symétrie P n'est pas parfaitement restaurée dans cette phase. Cela prouve que ce choix d'opérateur n'est pas assez riche, comme nous l'avons discuté dans le chapitre sur le choix de l'opérateur d'excitation dans la méthode SCRPA. Il est intéressant de choisir un opérateur d'excitation ayant la même symétrie que l'opérateur de symétrie lui même. Puisqu'on ne peut pas inclure les termes diagonaux de type $B^\dagger B$ (voir ci-dessus), on doit par conséquent inclure des termes quadratiques en B de type $B^\dagger B^\dagger$ et BB. Dans ce cas l'opérateur d'excitation RPA s'écrit sous la forme :

$$Q_\nu^\dagger = X_\nu t^+ - Y_\nu t^- + \lambda_\nu B^\dagger - \mu_\nu B + U_\nu \beta^\dagger \beta^\dagger - V_\nu \beta\beta, \quad \nu = 1, 2, 3. \tag{2.19}$$

avec,

$$t^\pm = \frac{T^\pm}{\sqrt{-2\langle T^0 \rangle}} \quad \text{et} \quad \beta^\dagger\beta^\dagger = \frac{B^\dagger B^\dagger}{\sqrt{2(1 + 2\langle B^\dagger B \rangle)}}. \tag{2.20}$$

Les valeurs moyennes $\langle T^0 \rangle$ et $\langle B^\dagger B \rangle$ sont évaluées dans le vide RPA défini par :

$$Q_\nu |\text{RPA}\rangle = 0. \tag{2.21}$$

Dans ce cas, les relations d'orthonormalisation et de fermeture sont données par :

Relations d'orthonormalisation

$$\begin{aligned} X_\nu^2 + \lambda_\nu^2 + U_\nu^2 - Y_\nu^2 - \mu_\nu^2 - V_\nu^2 = 1, \nu = 1, 2, 3 \\ X_1X_2 + \lambda_1\lambda_2 + U_1U_2 - Y_1Y_2 - \mu_1\mu_2 - V_1V_2 = 0, \\ X_1X_3 + \lambda_1\lambda_3 + U_1U_3 - Y_1Y_3 - \mu_1\mu_3 - V_1V_3 = 0, \\ X_2X_3 + \lambda_2\lambda_3 + U_2U_3 - Y_2Y_3 - \mu_2\mu_3 - V_2V_3 = 0, \\ X_2Y_1 - X_1Y_2 + \lambda_2\mu_1 - \lambda_1\mu_2 + U_2V_1 - U_1V_2 = 0, \\ X_3Y_1 - X_1Y_3 + \lambda_3\mu_1 - \lambda_1\mu_3 + U_3V_1 - U_1V_3 = 0, \\ X_3Y_2 - X_2Y_3 + \lambda_3\mu_2 - \lambda_2\mu_3 + U_3V_2 - U_2V_3 = 0, \end{aligned} \tag{2.22}$$

Relations de fermeture

$$\sum_\nu X_\nu^2 - Y_\nu^2 = 1, \quad \sum_\nu \lambda_\nu^2 - \mu_\nu^2 = 1, \quad \sum_\nu U_\nu^2 - V_\nu^2 = 1, \quad \nu = 1,2,3$$

$$\sum_\nu \lambda_\nu X_\nu - Y_\nu \mu_\nu = 0, \quad \sum_\nu X_\nu U_\nu - Y_\nu V_\nu = 0, \quad \sum_\nu U_\nu \mu_\nu - V_\nu \lambda_\nu = 0$$

$$\sum_\nu X_\nu \mu_\nu - Y_\nu \lambda_\nu = 0, \quad \sum_\nu \lambda_\nu U_\nu - \mu_\nu V_\nu = 0, \quad \sum_\nu X_\nu V_\nu - Y_\nu U_\nu = 0. \tag{2.23}$$

Comme nous l'avons déjà expliqué, l'inversion de l'opérateur d'excitation est immédiate ; on obtient alors :

$$\begin{pmatrix} t^- \\ B \\ \beta\beta \\ t^+ \\ B^\dagger \\ \beta^\dagger\beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & Y_1 & Y_2 & Y_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \\ U_1 & U_2 & U_3 & V_1 & V_2 & V_3 \\ Y_1 & Y_2 & Y_3 & X_1 & X_2 & X_3 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 & \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \\ V_1 & V_2 & V_3 & U_1 & U_2 & U_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \\ Q_1^\dagger \\ Q_2^\dagger \\ Q_3^\dagger \end{pmatrix} \tag{2.24}$$

2.1.6 Matrice RPA

Suivant la méthode expliquée dans la deuxième partie et par analogie avec le cas du modèle de pairing à deux niveaux, à partir de l'équation séculaire suivante :

$$\langle [\delta Q, [H', Q_\nu^\dagger]] \rangle = \Omega_\nu \langle [\delta Q, Q_\nu^\dagger] \rangle \tag{2.25}$$

on peut obtenir les équations SCRPA sous forme matricielle comme suit :

$$\begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & A_{1,3} & B_{1,1} & B_{1,2} & B_{1,3} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & A_{2,3} & B_{2,1} & B_{2,2} & B_{2,3} \\ A_{3,1} & A_{3,2} & A_{3,3} & B_{3,1} & B_{3,2} & B_{3,3} \\ -B_{1,1} & -B_{1,2} & -B_{1,3} & -A_{1,1} & -A_{1,2} & -A_{1,3} \\ -B_{2,1} & -B_{2,2} & -B_{2,3} & -A_{2,1} & -A_{2,2} & -A_{2,3} \\ -B_{3,1} & -B_{3,2} & -B_{3,3} & -A_{3,1} & -A_{3,2} & -A_{3,3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_\nu \\ \lambda_\nu \\ U_\nu \\ Y_\nu \\ \mu_\nu \\ V_\nu \end{pmatrix} = \Omega_\nu \begin{pmatrix} X_\nu \\ \lambda_\nu \\ U_\nu \\ Y_\nu \\ \mu_\nu \\ V_\nu \end{pmatrix} \tag{2.26}$$

où les éléments de matrice RPA sont donnés par :

$$\begin{aligned}
A_{1,1} &= (1+\mu)(u^2 - v^2) - 4Guv\sigma + G\frac{\sqrt{-2\langle T^0\rangle}}{\langle T^0\rangle}(-v^2\langle t^- B^\dagger\rangle + u^2\langle t^- B\rangle) \\
A_{1,2} &= A_{2,1} = -G\sqrt{-2\langle T^0\rangle}v^2 \\
A_{1,3} &= A_{3,1} = -\frac{4Guv}{\sqrt{2(1+2\langle B^\dagger B\rangle)}}\langle t^- B^\dagger\rangle \\
A_{2,2} &= (\alpha - \mu) \\
A_{2,3} &= A_{3,2} = 0 \\
A_{3,3} &= 2(\alpha-\mu) + 2G\frac{\sqrt{-2\langle T^0\rangle}}{1+2\langle B^\dagger B\rangle}(-v^2\langle t^+ B\rangle + u^2\langle t^- B\rangle) \\
B_{1,1} &= G\frac{\sqrt{-2\langle T^0\rangle}}{\langle T^0\rangle}(u^2\langle t^- B^\dagger\rangle - v^2\langle t^- B\rangle) \\
B_{1,2} &= B_{2,1} = G\sqrt{-2\langle T^0\rangle}u^2 \\
B_{1,3} &= B_{3,1} = -\frac{4Guv}{\sqrt{2(1+2\langle B^\dagger B\rangle)}}\langle t^- B\rangle \\
B_{2,2} &= 0 \\
B_{2,3} &= B_{3,2} = 0 \\
B_{3,3} &= 0
\end{aligned} \tag{2.27}$$

2.1.7 Minimisation d'énergie

Suivant la même démarche que dans le cas du modèle à deux niveaux, les paramètres de la transformation de Bogoliubov u et v ainsi que le condensat σ sont obtenus à partir de la minimisation de la valeur moyenne du Hamiltonien contraint H' dans l'état fondamental RPA. On peut donc écrire :

$$\frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial u}+\frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial u}=\langle[H',t^+]\rangle=0, \tag{2.28}$$

$$\frac{\partial\langle H'\rangle}{\partial \sigma}=\langle[H',B^\dagger]\rangle=0, \tag{2.29}$$

où,

$$\begin{aligned}\langle H'\rangle &= (1+\mu)(\frac{N}{2}+(u^2-v^2)\langle T^0\rangle)+(\alpha-\mu)(\sigma^2+\langle B^\dagger B\rangle)-4uvG\sigma\langle T^0\rangle \\ &+ 2G\sqrt{-2\langle T^0\rangle}(u^2\langle t^+B^\dagger\rangle-v^2\langle t^-B^\dagger\rangle).\end{aligned} \tag{2.30}$$

Par conséquent, à partir de l'équation (2.28) on obtient l'équation du champ moyen généralisé suivante :

$$2\xi uv+\Delta(v^2-u^2)=0, \tag{2.31}$$

où le gap Δ ainsi que l'énergie à une particule renormalisée ξ sont donnés par :

$$\Delta=4G\langle T^0\rangle\sigma,\quad \xi=\frac{J_f-I_f}{2} \tag{2.32}$$

avec,

$$\begin{aligned}I_f &= 2\Big((1+\mu)\langle T^0\rangle+G\sqrt{-2\langle T^0\rangle}(\langle t^+B^\dagger\rangle+\langle t^-B\rangle)\Big)\\ J_f &= -2\Big((1+\mu)\langle T^0\rangle+G\sqrt{-2\langle T^0\rangle}(\langle t^-B^\dagger\rangle+\langle t^+B\rangle)\Big).\end{aligned} \tag{2.33}$$

Les amplitudes de champ moyen u et v sont données par :

$$\begin{aligned}u^2&=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}\right)\\ v^2&=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}\right).\end{aligned} \tag{2.34}$$

De la même manière, à partir de l'équation (2.29) on obtient le condensat σ :

$$\sigma=\frac{2Guv\langle T^0\rangle}{\alpha-\mu}. \tag{2.35}$$

En utilisant, la méthode de calcul des nombres d'occupation des quasi-particules présentée dans la partie consacrée au modèle d'appariement à deux niveaux, on peut déduire une expression pour T^0 :

$$T^0=-\frac{N}{2}+\frac{1}{N}T^+T^-+\frac{1}{N^2(N-1)}T^{+2}T^{-2}+\dots. \tag{2.36}$$

Tenant compte de (2.24) et de (2.21) et sans connaître l'état fondamental RPA explicitement, on peut calculer toutes les valeurs moyennes et ainsi fermer le système d'équations non-linéaires SCRPA. Par conséquent, il ne reste qu'à résoudre ce système d'équations.

2.2 Zone sphérique

Dans cette région, qui est caractérisée par une constante de couplage $x \leqslant 1$, la symétrie n'est pas brisée. Il est donc inutile de faire une transformation de Bogoliubov et nous travaillons alors dans la base sphérique (base de particules) ; dans ce cas on peut écrire :

$$u^2 = 1, \quad v^2 = 0 \Longrightarrow \begin{cases} \alpha_{0k} = \gamma_{0k} \\ \alpha^\dagger_{1k} = \gamma^\dagger_{1k} \end{cases} \tag{2.37}$$

Puisqu'il n'y aura pas de brisure de symétrie (condensation des bosons), les bosons ne subissent plus de "shift", il n'y aura plus de chapeau mexicain, le condensat disparaît alors et on peut écrire pour les bosons :

$$B = b. \tag{2.38}$$

Dans cette phase et avec cette définition, le Hamiltonien du modèle devient :

$$H = \frac{N}{2} + \tau^0 + \alpha b^\dagger b + G(\tau^+ b^\dagger + \tau^- b) \tag{2.39}$$

2.2.1 RPA Self-Consistante

Nous rappelons que l'état fondamental RPA est défini par la relation suivante :

$$Q^\dagger_\nu |\mathrm{RPA}\rangle = 0, \tag{2.40}$$

et que, dans la méthode SCRPA, les états excités $|\nu\rangle$ sont définis par :

$$|\nu\rangle = Q^\dagger_\nu |\mathrm{RPA}\rangle. \tag{2.41}$$

Dans cette région l'opérateur d'excitation RPA est donné par :

$$Q^\dagger_\nu = X_\nu t^+ - Y_\nu t^- + \lambda_\nu b^\dagger - \mu_\nu b + U_\nu \beta^\dagger\beta^\dagger - V_\nu \beta\beta, \quad \nu = 1,2,3 \tag{2.42}$$

avec :

$$t^\pm = \frac{\tau^\pm}{\sqrt{-2\langle\tau^0\rangle}} \quad \text{et} \quad \beta^\dagger\beta^\dagger = \frac{b^\dagger b^\dagger}{\sqrt{2(1+2\langle b^\dagger b\rangle)}}. \tag{2.43}$$

ce qui prouve que $\langle[Q_\nu, Q^\dagger_{\nu'}]\rangle = \delta_{\nu,\nu'}$. Procédant de la même façon que dans la région déformée, l'opérateur d'excitation RPA est alors inversé. De plus, en utilisant le définition du vide RPA on peut calculer tous les double-commutateurs et ainsi obtenir les éléments de la matrice RPA :

$$\begin{array}{lll}
A_{1,1} = 1 + G\frac{\sqrt{-2\langle\tau^0\rangle}}{\langle\tau^0\rangle}\langle t^- B\rangle & ; & B_{1,1} = G\frac{\sqrt{-2\langle\tau^0\rangle}}{\langle\tau^0\rangle}\langle t^- B^\dagger\rangle \\
A_{1,2} = A_{2,1} = 0 & ; & B_{1,2} = B_{2,1} = G\sqrt{-2\langle\tau^0\rangle} \\
A_{1,3} = A_{3,1} = 0 & ; & B_{1,3} = B_{3,1} = 0 \\
A_{2,2} = \alpha & ; & B_{2,2} = 0 \\
A_{2,3} = A_{3,2} = 0 & ; & B_{2,3} = B_{3,2} = 0 \\
A_{3,3} = 2\alpha + 2G\frac{\sqrt{-2\langle\tau^0\rangle}}{1+2\langle B^\dagger B\rangle}\langle t^- B\rangle & ; & B_{3,3} = 0.
\end{array} \tag{2.44}$$

En utilisant l'inversion de l'opérateur d'excitation RPA et encore une fois la définition du vide RPA, on peut facilement calculer les valeurs moyennes en fonction des amplitudes RPA. La densité à un corps τ^0 est obtenue en utilisant l'équivalent du développement (2.36) dans la région sphérique :

$$\tau^0 = -\frac{N}{2} + \frac{1}{N}\tau^+\tau^- + \frac{1}{N^2(N-1)}{\tau^+}^2{\tau^-}^2 + \ldots. \tag{2.45}$$

Par conséquent, on peut facilement exprimer $\langle\tau^0\rangle$ en fonction des amplitude RPA. De la même manière l'énergie du fondamental dans la méthode SCRPA est aussi donnée en fonction des amplitudes RPA par :

$$E = \frac{N}{2} + \langle\tau^0\rangle + \alpha\langle b^\dagger b\rangle + G\sqrt{-2\langle\tau^0\rangle}\Big(\langle t^+ b^\dagger\rangle + \langle t^- b\rangle\Big). \tag{2.46}$$

Chapitre 3

Résultats et discussion

Nous arrivons maintenant à l'analyse des résultats obtenus avec la méthode SCRPA. Nous présentons d'abord les résultats du calcul exact, ensuite nous effectuons la comparaison de nos résultats avec ceux déjà obtenus par Bertrand *et al.* en utilisant le même formalisme, mais en ne tenant compte que des termes linéaires en bosons dans l'opérateur d'excitation RPA. Evidemment, on compare aussi nos résultats avec ceux de la méthode RPA standard (Ber98). Nous commençons d'abord par la présentation des résultats du calcul exact et ensuite nous détaillons la discussion des résultats de la méthode SCRPA.

3.1 Résultats exacts

Les résultats exacts sont obtenus en diagonalisant le Hamiltonien du modèle. Comme cela a été déjà signalé, le modèle présente une structure en bande similaire aux bandes rotationnelles du noyau. Sur la figure (3.1) on montre quelques bandes de l'énergie fondamentale de ce modèle en fonction de l'interaction réduite :

$$x = G\sqrt{\frac{N}{\alpha}},$$

pour une constante de couplage bosonique $\alpha = 3$ et pour un nombre de particules $N = 30$. En examinant attentivement les deux figures, on remarque que, suivant les valeurs des paramètres α, G et N (c'est-à-dire de x), le système présente un changement de phase. On constate tout d'abord que pour $x \leqslant 1$ (faibles valeurs de G ou de N en gardant α fixe), le système demeure toujours dans une phase dite phase sphérique, puisque l'énergie fondamentale absolue correspond à la valeur propre de l'opérateur de symétrie P pour l'état fondamental non perturbé : $L = 0$. Cependant, pour $(x > 1)$ (grandes valeurs de G ou de N), le système change de phase et l'énergie fondamentale absolue n'est plus celle correspondant à $L = 0$ mais correspond à une valeur de L non nulle et suivant le signe de L, on peut définir la nature du condensat qui se forme. Par exemple, pour $L > 0$ il y a une condensation de bosons alors que pour $L < 0$ il y aura une condensation de particule-trous. Nous avons vu en effet que l'espace de Hilbert est défini par les vecteurs :

$$|kl\rangle = \tau^{+^k} b^{\dagger^l} |\phi\rangle. \tag{3.1}$$

Par suite si $L > 0$, l'état fondamental est "dominé" par la partie bosonique $b^{\dagger^l}|\phi\rangle$, contrairement au cas où $L < 0$ qui correspond à une "domination" de la condensation de paires de fermions $\tau^{+^k}|\phi\rangle$ (particule-trou). Rappelons que l'énergie fondamentale absolue qui correspond à l'état le plus stable du modèle, est la plus petite énergie de toutes ces énergies fondamentales.

Dans le tableau 3.1 on donne l'énergie fondamentale absolue pour une bande E^0_L, la valeur propre de l'opérateur de symétrie P correspondante notée L, les plus basses énergies d'excitation $\Delta E_{\pm 1} = E^0_{L\pm 1} - E^0_L$, $\Delta E_{\pm 2} = E^0_{L\pm 2} - E^0_L$ et l'énergie du premier niveau excité $\Delta E_L = E^1_L - E^0_L$, pour différentes valeurs de la constante de couplage réduite x couvrant les deux régions du modèle.

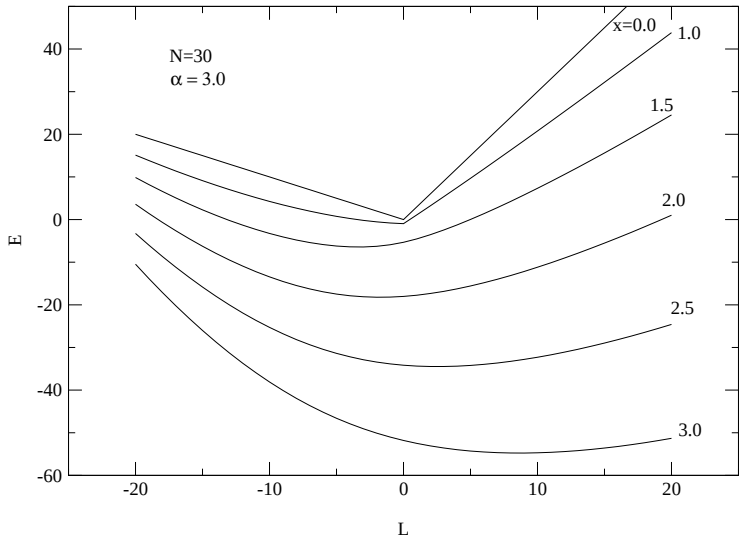

FIG. 3.1 – Spectre de bande de l'énergie fondamentale pour $\alpha = 3$, $N = 30$ comme fonction de l'interaction $x = G\sqrt{\frac{N}{\alpha}}$.

Si $\Delta E_{\pm 1}$ correspond à la différence d'énergie entre le niveau fondamental absolu de symétrie L et les premiers états excités de symétrie $L \pm 1$, $\Delta E_{\pm 2}$ concerne les états excités de symétrie $L \pm 2$.

3.2 Discussion et résultats en SCRPA

Tout d'abord, nous rappelons que le modèle de Da-providencia et Schütte mélange les fermions et les bosons. Par conséquent, son traitement dans les approximations de type champ moyen s'avère un peu différent que les modèles à fermions ou à bosons. Il est bien connu que l'application de la méthode SCRPA à des modèles ne mélangeant pas les fermions et les bosons donne de très bons résultats. Ainsi, nous espérons que son application à ce modèle nous donne aussi de très bons résultats (DS91; DS96; SDR97; KPD$^+$98; DHS00; DDS$^+$00; HMDS02; RBCS02). Dans cet paragraphe nous allons présenter les résultats de l'application de la méthode SCRPA à ce modèle. En fait, ce travail est une extension, comme cela a été déjà signalé au début de cette partie, d'un travail effectué par Bertrand *et al.*. Les résultats déjà obtenus dans la référence (BSC$^+$01) vont être notés "SCRPA(4)", tandis que les nôtres seront notés "SCRPA(6)". Les arguments 4 et 6 ne sont pas choisis par hasard; ils indiquent les dimensions des matrices RPA dans chaque cas. Nous signalons aussi que dans la SCRPA(4) les nombres d'occupation sont calculés au premier ordre en T^+T^- du développement (2.36) alors que ceux de la SCRPA(6) sont poussés au second ordre. Avant de commencer la discussion nous rappelons brièvement l'essentiel des résultats obtenus lors de l'application de la méthode SCRPA(4). En comparaison avec la méthode RPA standard et les résultats exacts, la méthode SCRPA(4) a donnée de bons résultats concernant l'énergie fondamentale dans les deux zones sphérique et déformée et également pour les énergies d'excitation obtenues à l'aide des différences d'énergies calculées séparément. Implicitement, cela indique qu'elle a donnée de bons résultats pour le potentiel chimique. Le seul problème qui subsiste est celui de l'identification des valeurs propres SCRPA à des énergies d'excitation du système. Dans les deux régions du modèle, une valeur propre, celle de haute énergie notée Ω_2, a été identifiée alors que l'autre de faible énergie Ω_1, qui est liée intimement à la brisure de la symétrie P dans la zone déformée, a été identifiée seulement dans la région sphérique. Au niveau des approximations de champ moyen,

x	L	E^0_L	ΔE_{+1}	ΔE_{-1}	ΔE_{+2}	ΔE_{-2}	ΔE_L
0.0	0	0.000000	3.0000	1.0000	6.000	2.0000	4.0000
0.1	0	-0.007513	2.9925	0.9930	5.985	1.9865	3.9860
0.2	0	-0.030213	2.9698	0.9718	5.940	1.9457	3.9437
0.3	0	-0.068597	2.9315	0.9361	5.863	1.8769	3.8724
0.4	0	-0.123554	2.8767	0.8852	5.754	1.7791	3.7709
0.5	0	-0.196474	2.8043	0.8180	5.609	1.6503	3.6374
0.6	0	-0.289435	2.7123	0.7330	5.426	1.4881	3.4693
0.7	0	-0.405551	2.5982	0.6282	5.200	1.2891	3.2632
0.8	0	-0.549608	2.4581	0.5006	4.923	1.0487	3.0149
0.9	0	-0.729369	2.2865	0.3461	4.587	0.7614	2.7197
1.0	0	-0.958498	2.0755	0.1599	4.180	0.4212	2.3742
1.1	-1	-1.326407	0.0624	0.0885	1.877	0.3016	2.3027
1.2	-2	-2.111704	0.0914	0.0755	0.404	0.2893	2.3794
1.3	-3	-3.255938	0.0435	0.1220	0.291	0.3855	2.5900
1.4	-3	-4.714530	0.1230	0.0581	0.463	0.2728	2.6285
1.5	-3	-6.425457	0.1537	0.0288	0.512	0.2208	2.7706
1.6	-3	-8.380373	0.1424	0.0326	0.469	0.2279	2.9979
1.7	-3	-10.55536	0.1022	0.0627	0.372	0.2838	3.2816
1.8	-3	-12.92089	0.0436	0.1118	0.241	0.3767	3.5971
1.9	-2	-15.47508	0.1174	0.0267	0.372	0.2010	3.8694
2.0	-2	-18.21745	0.0324	0.1047	0.195	0.3508	4.2299
2.1	-1	-21.13705	0.0693	0.0560	0.256	0.2439	4.6032
2.2	0	-24.21900	0.0891	0.0251	0.285	0.1719	5.0229
2.3	1	-27.46823	0.0965	0.0082	0.290	0.1286	5.4712
2.4	2	-30.88530	0.0947	0.0020	0.279	0.1076	5.9383
2.5	3	-34.46832	0.0861	0.0037	0.256	0.1038	6.4189
2.6	4	-38.21421	0.0726	0.0116	0.224	0.1133	6.9103
2.7	5	-42.11926	0.0552	0.0241	0.185	0.1329	7.4109
2.8	6	-46.17964	0.0349	0.0402	0.140	0.1604	7.9198
2.9	7	-50.39150	0.0124	0.0591	0.092	0.1941	8.4366
3.0	9	-54.76296	0.0526	0.0118	0.166	0.0919	9.1234

TAB. 3.1 – Energies fondamentales absolues exactes, E^0_L, pour différentes valeurs de la constante de couplage réduite, x. Pour chaque valeur de x, on donne aussi, les plus basses énergies d'excitation avec $L = L \pm 1$, $\Delta E_{\pm 1} = E^0_{L\pm 1} - E^0_L$, et $L = L \pm 2$, $\Delta E_{\pm 2} = E^0_{L\pm 2} - E^0_L$, et le premier niveau excité $\Delta E_L = E^1_L - E^0_L$.

puisque ce modèle est considéré comme un système fini, la symétrie est artificiellement brisée (elle n'est pas réellement brisée) et on ne doit pas obtenir un mode de Goldstone, comme dans la RPA. Dans la méthode SCRPA, lorsqu'on restaure cette symétrie, cette valeur propre doit s'identifier avec une énergie parmi les énergies d'excitation du système (voir chapitre brisure et restauration de symétrie). Cependant, le problème, dans ce modèle, s'avère un peu délicat puisque la symétrie a restaurer est une symétrie liée au nombre de particules qui possède des termes hermitiques. Nous avons pourtant essayé d'incorporer des termes quadratiques en bosons dans l'opérateur d'excitation RPA, dans le but d'utiliser un opérateur ayant la même symétrie que l'opérateur de symétrie P, qui est quadratique en opérateurs de bosons ; cela constitue la méthode SCRPA(6). Dans tout ce qui suit, on travaille dans la configuration ayant une constante de couplage bosonique $\alpha = 3$ et un nombre de particules $N = 30$. Nous allons commencer par présenter les résultats concernant l'énergie fondamentale, puis étudier l'identification des valeurs propres SCRPA(6) et enfin nous allons évoquer et discuter l'idée de la correction des valeurs propres dans la méthode SCRPA.

En ce qui concerne l'énergie du fondamental, le même scénario que celui du modèle à deux

niveaux se répète. La méthode SCRPA améliore la prise en compte des corrélations dans l'état fondamental par rapport à la méthode RPA, "sans briser" le principe variationnel. Sur les figures (3.2) et (3.3) nous représentons les énergies de l'état fondamental dans les deux régions, sphérique et déformée, du modèle. En outre, pour en savoir plus sur ce qui se passe au voisinage du point de transition, nous représentons dans la figure (3.4) un agrandissement de la courbe de l'énergie fondamentale localisé autour de $x = 1$. Nous remarquons sur ces figures que la méthode RPA brise le principe variationnel, en dépit du fait qu'elle donne des résultats plus proches des résultats exacts que la méthode SCRPA. De plus, au voisinage de la transition de phase, qui se produit à $x = 1$, la violation du principe variationnel devient assez importante. D'ailleurs, cela n'est pas surprenant, il est lié à la violation du principe de Pauli dans la méthode RPA. Nous avons déjà rencontré ce problème dans le modèle à deux niveaux et nous l'avons abondamment discuté. Par contre, il est intéressant de discuter les résultats de la méthode SCRPA et la sensibilité de la méthode au calcul du nombre d'occupation. Nous rappelons que c'est la seule quantité approximée dans la méthode SCRPA. Dans le tableau (3.2) nous présentons les résultats de l'énergie fondamentale

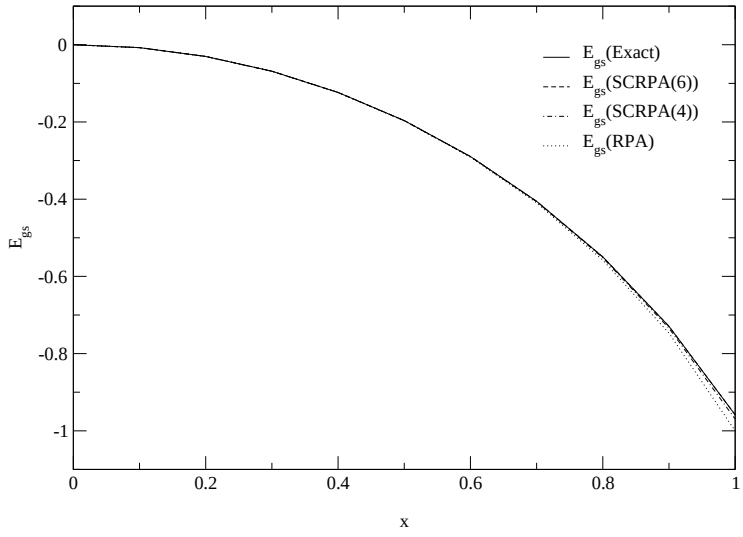

FIG. 3.2 – Energie de l'état fondamental absolu E_L^0 dans la zone sphérique en fonction de la constante de couplage réduite x.

exacte, SCRPA(6) puis SCRPA(4), d'une part en utilisant le développement (2.36) au second ordre, soit "$E^0_{SCRPA(4)}(II)$", et d'autre part en utilisant le développement (2.36) au premier ordre, soit "$E^0_{SCRPA(4)}(I)$" et RPA. Nous remarquons que le développement (2.36) est rapidement convergent, comme cela est attendu. Par ailleurs, nous notons que, dans la région sphérique, les résultats de la méthode SCRPA(6) sont "presque" identiques au résultat exact, même au voisinage du point de transition. Dans la région sphérique, la précision de la méthode SCRPA s'étend au quatrième chiffre après le virgule. Près du point de transition, le résultat devient très sensible au calcul du nombre d'occupation; c'est pour cela que le premier ordre du développement ne suffit pas pour respecter le principe de Pauli. Ainsi, nous remarquons que l'énergie fondamentale $E^0_{SCRPA(4)}(I)$ brise légèrement le principe variationnel alors que pour la SCRPA(4)(II) seul le quatrième chiffre change; c'est pour cela qu'on peut dire que la méthode SCRPA possède un caractère variationnel. Dans la région déformée, nous remarquons que l'inclusion des termes quadratiques dans l'opérateur d'excitation RPA diminue légèrement la prise en compte des corrélations dans l'état fondamental.

Pour avoir plus d'information sur les corrélations, nous présentons les résultats des énergies d'excitation $\Delta E_{\pm 1}$ qui se calculent à l'aide des différences entre l'énergie fondamentale E_L^0 et les

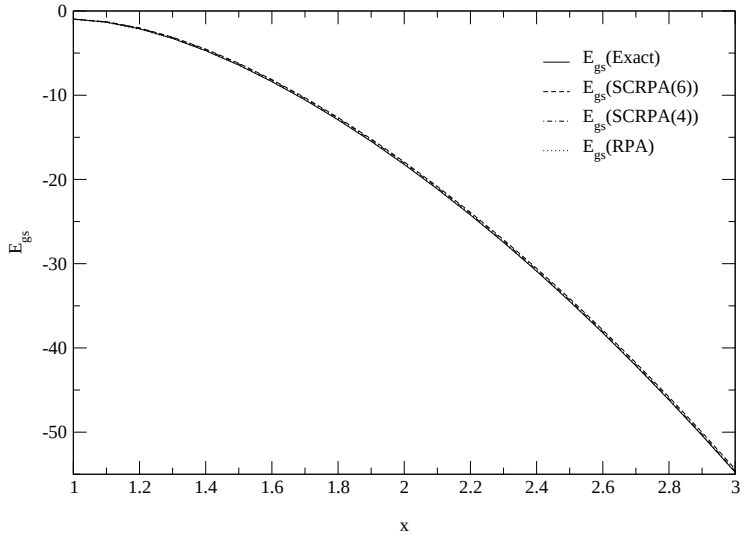

FIG. 3.3 – Energie de l'état fondamental absolu E_L^0 dans la zone déformée en fonction de la constante de couplage réduite x.

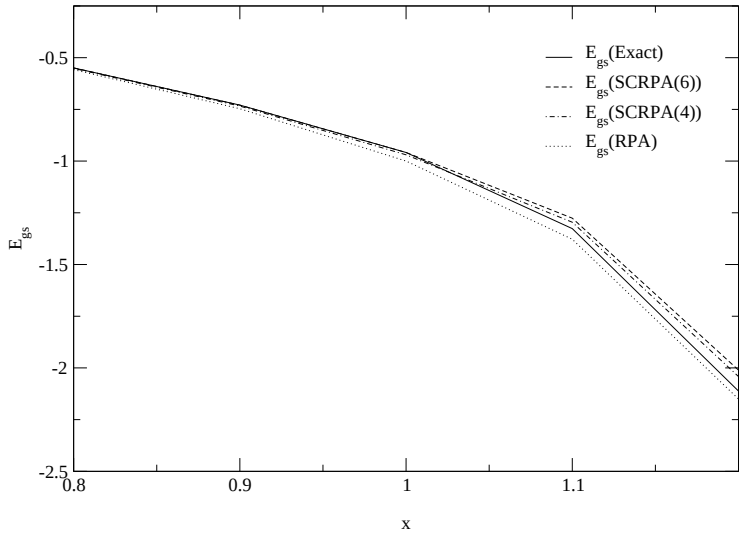

FIG. 3.4 – Agrandissement de la courbe de l'énergie de l'état fondamental (au voisinage du point de transition).

énergies des états excités $E_{L\pm1}^0$. Dans les figures (3.5) et (3.6), nous remarquons que les résultats de la méthode SCRPA suivent étroitement les résultats exacts. Par conséquent, à l'aide de la méthode SCRPA on peut reproduire tout le spectre en bande du Hamiltonien du modèle avec une bonne précision.

Une quantité qui est étroitement liée à la précision de la mesure de l'énergie fondamentale et qui nécessite d'être examinée, est le potentiel chimique. Nous signalons que cette quantité s'identifie

x	L	E^0_L	$E^0_{SCRPA(6)}$	$E^0_{SCRPA(4)}(II)$	$E^0_{SCRPA(4)}(I)$	E^0_{RPA}
0.0	0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.1	0	-0.007513	-0.007513	-0.007513	-0.007513	-0.007514
0.2	0	-0.030213	-0.030213	-0.030213	-0.030217	-0.030228
0.3	0	-0.068597	-0.068597	-0.068597	-0.068618	-0.068679
0.4	0	-0.123554	-0.123554	-0.123554	-0.123626	-0.123834
0.5	0	-0.196474	-0.196474	-0.196474	-0.196669	-0.197224
0.6	0	-0.289435	-0.289437	-0.289437	-0.289901	-0.291199
0.7	0	-0.405551	-0.405557	-0.405557	-0.406588	-0.409403
0.8	0	-0.549608	-0.549626	-0.549626	-0.551844	-0.557779
0.9	0	-0.729369	-0.729411	-0.729411	-0.734226	-0.747004
1.0	0	-0.958498	-0.958558	-0.958558	-0.969530	-1.000000
1.1	-1	-1.326407	-1.275965	-1.275436	-1.295492	-1.377984
1.2	-2	-2.111704	-2.010522	-2.009303	-2.041516	-2.150376
1.3	-3	-3.255938	-3.110122	-3.109764	-3.153820	-3.277031
1.4	-3	-4.714530	-4.529602	-4.531654	-4.590649	-4.720310
1.5	-3	-6.425457	-6.206648	-6.213156	-6.284275	-6.417288
1.6	-3	-8.380373	-8.136770	-8.148729	-8.227441	-8.364072
1.7	-3	-10.555365	-10.294028	-10.311450	-10.394627	-10.535251
1.8	-3	-12.920890	-12.646159	-12.668461	-12.754503	-12.899198
1.9	-2	-15.475079	-15.184974	-15.217926	-15.308575	-15.449293
2.0	-2	-18.217451	-17.917384	-17.955396	-18.047221	-18.192463
2.1	-1	-21.137050	-20.827571	-20.875907	-20.969612	-21.111776
2.2	0	-24.219003	-23.902130	-23.960478	-24.055057	-24.194664
2.3	1	-27.468230	-27.144787	-27.212825	-27.307777	-27.445281
2.4	2	-30.885295	-30.555480	-30.632958	-30.728035	-30.863814
2.5	3	-34.468325	-34.132227	-34.218806	-34.313853	-34.448239
2.6	4	-38.214205	-37.871712	-37.967157	-38.062210	-38.195383
2.7	5	-42.119261	-41.770276	-41.874353	-41.969379	-42.101567
2.8	6	-46.179636	-45.824065	-45.936541	-46.031584	-46.162940
2.9	7	-50.391497	-50.029266	-50.149970	-50.245019	-50.375683
3.0	9	-54.762963	-54.395791	-54.529802	-54.623188	-54.748927

TAB. 3.2 – Energies fondamentales absolues exacte, SCRPA(6), SCRPA(4) et RPA pour différentes valeurs de la constante de couplage réduite x.

à la contrainte introduite pour restaurer la symétrie. Nous rappelons que le potentiel chimique μ est défini par :

$$\mu = \frac{1}{2}(E^0_{L+1} - E^0_{L-1}) = \frac{1}{2}(\Delta E_{+1} - \Delta E_{-1}). \tag{3.2}$$

Les résultats concernant le potentiel chimique sont représentés sur la figure (3.7). Nous notons que les résultats de la méthode SCRPA suivent étroitement le résultat exact. Le résultat de la RPA est assez loin du résultat exact pour une large gamme de valeur de la constante de couplage. Nous remarquons que cela est incohérent avec les autres résultats relatifs à l'énergie fondamentale dans la méthode RPA (voir les figures (3.5) et (3.6)). D'ailleurs, cela constitue une preuve de l'inconsistance de cette méthode. En réalité, la contrainte imposée dans la méthode RPA ne correspond pas au potentiel chimique calculé par cette méthode.

Venons en à l'étude des valeurs propres de la méthode SCRPA. Nous allons commencer par la valeur propre de haute énergie Ω_2. Sur la figure (3.8), nous représentons cette valeur. Nous remarquons que dans la phase sphérique, Ω_2 s'identifie à l'énergie d'excitation exacte ΔE_{+1} (excitation intra-bande) et dans la phase déformée à l'énergie du premier état excité absolu (excitation intrinsèque) $\Delta E_L = E^1_L - E^0_L$ (c'est-à-dire l'énergie nécessaire pour passer de l'état fondamental

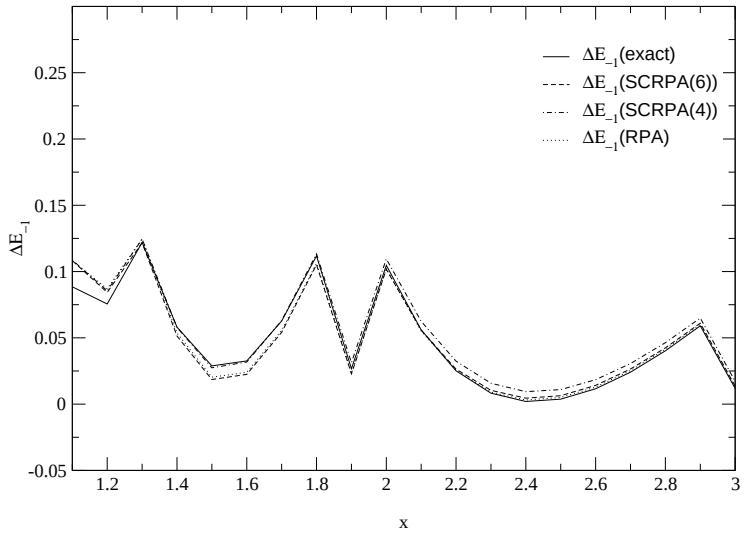

FIG. 3.5 – Energies d'excitation ΔE_{-1} en fonction de la constante de couplage réduite x.

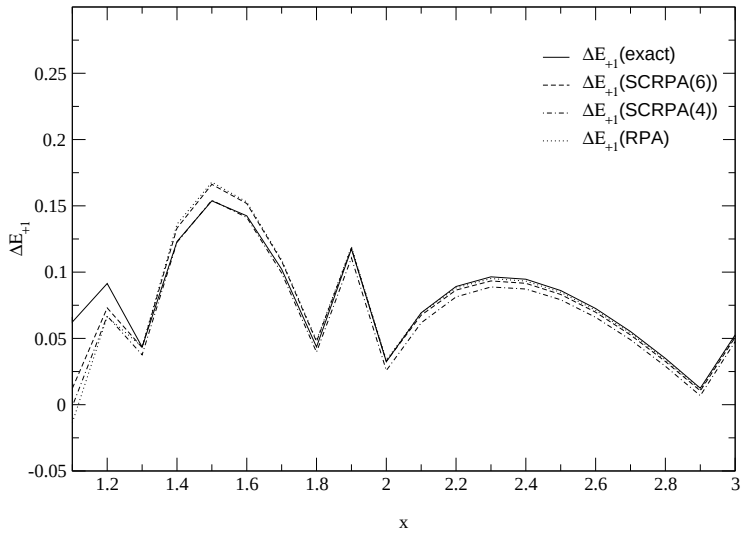

FIG. 3.6 – Energies d'excitation ΔE_{+1} en fonction de la constante de couplage réduite x.

absolu au premier excité). Cette identification est valable pour les deux méthodes SCRPA et RPA. Dans la région sphérique nous remarquons que l'identification est parfaite pour notre méthode alors que, au voisinage du point de transition, la méthode RPA présente une légère déviation. Dans la région déformée et loin du point de transition nous notons que la méthode SCRPA apporte une amélioration assez importante par rapport à la RPA. Cependant, nous constatons que la méthode SCRPA présente, dans une région proche du point de transition, une petite erreur par rapport au résultat exact mais toutefois toujours inférieure à celle de la RPA. Nous remarquons aussi que l'introduction des termes quadratiques dans l'opérateur RPA n'affecte pas ce mode d'excitation.

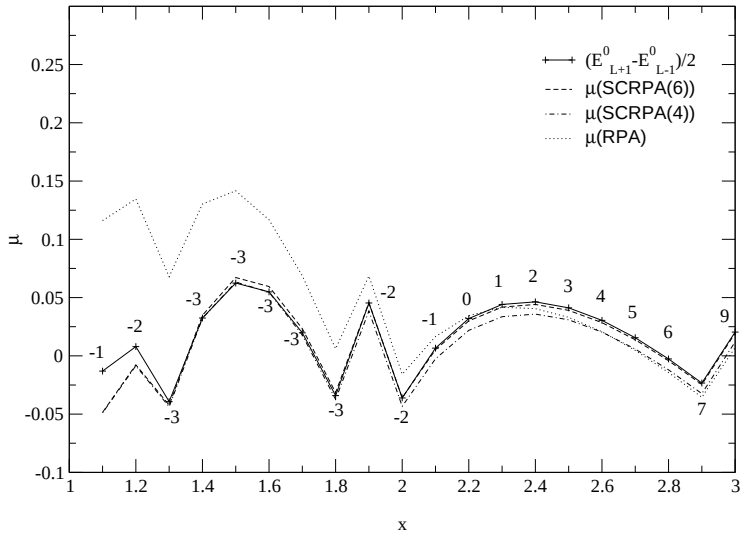

FIG. 3.7 – Comparaison entre l'énergie d'excitation $(E^0_{L+1} - E^0_{L-1})/2$ avec la contrainte de la SCRPA(4), puis la contrainte de la SCRPA(6), puis la contrainte de la RPA. A chaque variation de la courbe exacte, les valeurs propre de l'opérateur P sont indiquées.

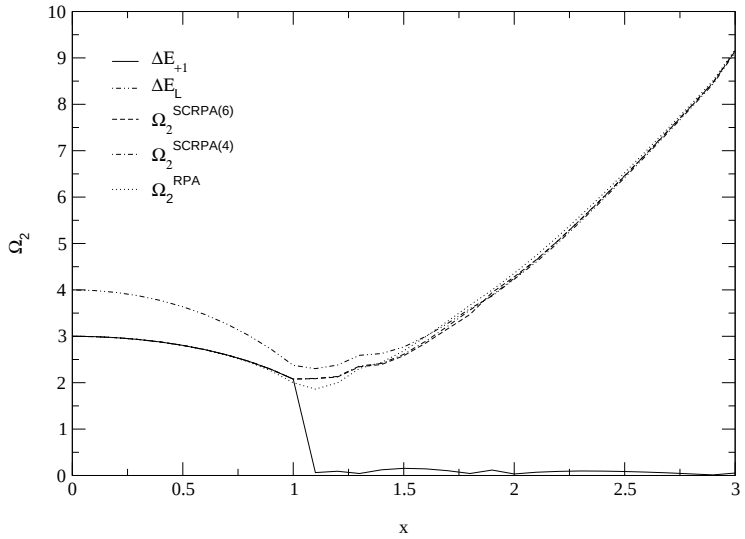

FIG. 3.8 – Energies d'excitation ΔE_{+1}, $\Delta E_L = E^1_L - E^0_L$ et les valeurs propres Ω_2 de la SCRPA(6), la SCRPA(4) et la RPA en fonction de la constante de couplage réduite x.

Un but majeur de ce travail est de résoudre le problème du mode spurieux dans la méthode SCRPA. Pour cela nous présentons les résultats pour le mode Ω_1 sur la figure (3.9). Nous remarquons ainsi que, dans la région sphérique ($x \leqslant 1$), le mode Ω_1 de la méthode SCRPA peut être interprété comme étant une excitation intra-bande du système, puisqu'il s'identifie exactement à l'excitation ΔE_{-1}. Bien que, le mode Ω_1 de la méthode RPA s'identifie aussi à cette excitation du

système, nous remarquons que notre méthode est plus proche du résultat exact que la méthode RPA. Dans la région déformée, il est bien connu que la méthode RPA engendre un mode de Goldstone. Dans notre méthode, nous notons que, même avec l'introduction des termes quadratiques en bosons dans l'opérateur d'excitation RPA, nous ne pouvons pas identifier le mode de basse énergie Ω_1 avec une excitation intrinsèque du système, et cela bien que la courbe représentative de ce mode suive grossièrement celle d'une excitation intra-bande (ΔE_{-1}). Par ailleurs, sur la figure (3.9) nous remarquons aussi, que la méthode SCRPA(6) (c'est-à-dire avec des termes quadratiques dans l'opérateur RPA) améliore légèrement le résultat de la SCRPA(4) (c'est-à-dire sans des termes quadratiques dans l'opérateur RPA). Ainsi, ce problème du mode spurieux subsiste encore et nous allons donc quand même, essayer d'autres idées. Nous signalons aussi que, contrairement à l'énergie du fondamental absolu, les valeurs propres SCRPA ne sont pas sensibles au calcul du nombre d'occupation. Par ailleurs, l'introduction des termes quadratiques dans l'opérateur d'excitation RPA se traduit par un mode propre supplémentaire aux deux modes déjà examinés; c'est le mode Ω_3 que nous envisageons d'analyser maintenant. Dans la région sphérique,

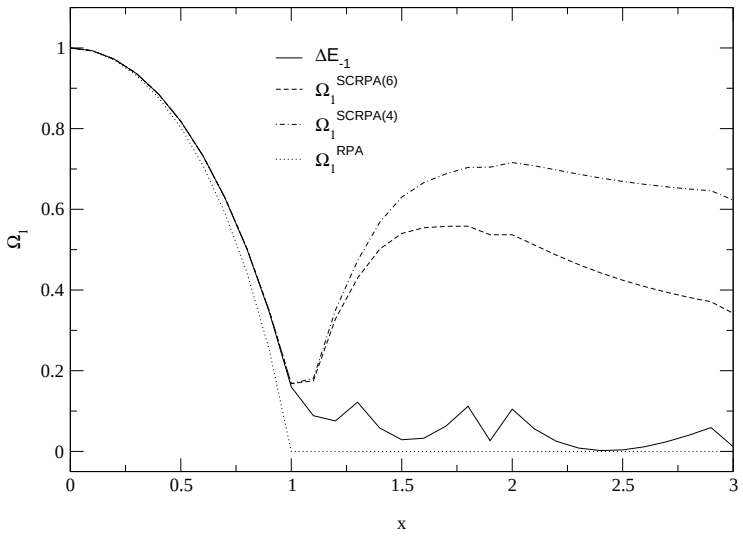

FIG. 3.9 – Energies d'excitation du mode mou (spurieux) en fonction de la constante de couplage réduite x.

le mode Ω_3 de la méthode SCRPA peut être interprété comme l'énergie d'excitation intra-bande ΔE_{+2}. Cependant, dans la région déformée, bien que la courbe représentative du mode Ω_3 suive l'allure d'une excitation intra-bande, nous n'avons, malheureusement, pas pu l'identifier.

Afin de compléter notre étude sur la prise en compte des corrélations dans nôtre méthode, nous envisageons, maintenant, analyser nos résultats concernant le nombre de boson dans l'état fondamental et aussi les résultats de la variance. Le nombre de boson dans l'état fondamental est défini par :

$$N_b = \langle b^\dagger b \rangle = \langle B^\dagger B \rangle + \sigma^2, \tag{3.3}$$

où $\langle B^\dagger B \rangle$ est donnée par :

$$\langle B^\dagger B \rangle = \mu_1^2 + \mu_2^2 + \mu_3^2. \tag{3.4}$$

Sur la figure (3.11) nous représentons le résultat de la différence entre la valeur approximée et la valeur exacte du nombre de boson dans l'état fondamental. Dans cette figure nous avons représenté en plus des résultats SCRPA(6) et SCRPA(4), les résultats RPA et aussi champ moyen. Dans la phase sphérique, nous remarquons que notre méthode améliore nettement le résultat par rapport à la méthode du champ moyen, cependant, par rapport à la méthode RPA standard l'amélioration

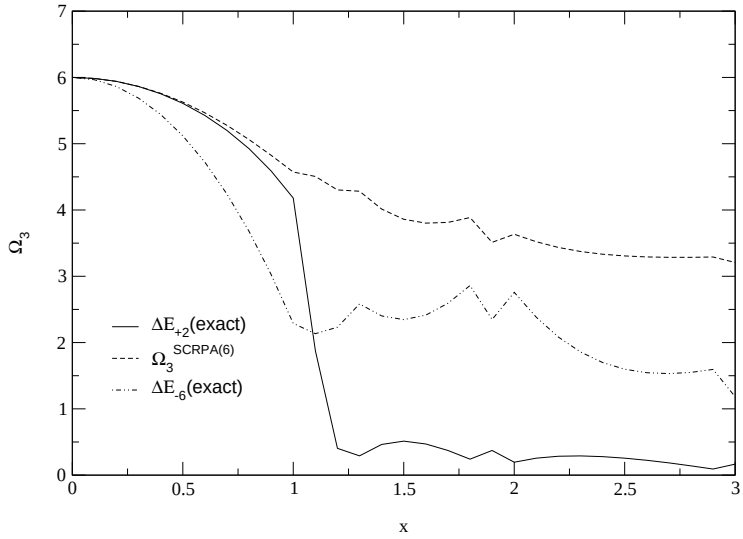

FIG. 3.10 – Energie d'excitation ΔE_{+2} et les valeurs propres Ω_3 de la SCRPA(6) et de la RPA en fonction de la constante de couplage réduite x.

est faible. *A contrario*, nous signalons qu'au voisinage du point de transition l'amélioration, de notre méthode par rapport à la méthode RPA, devient assez importante. Nous remarquons, aussi, que les SCRPA(6) et SCRPA(4) produisent, pratiquement, les mêmes résultats dans cette région. Dans la phase déformée, nous notons que, en comparaison avec le résultat du calcul champ moyen, la méthode SCRPA améliore nettement le résultat. De plus, nous remarquons que la SCRPA(6) améliore légèrement le résultat par rapport à la SCRPA(4). Par ailleurs, dans cette phase, nous n'avons pas donné le résultat de cette quantité dans la méthode RPA parce que cette méthode produit un mode de Goldstone qui empêche le calcul de cette quantité. En effet, à cause de ce mode, ayant des amplitudes RPA infinies, les relations de fermeture et d'orthonormalisation ne sont pas satisfaites. Ce problème nous l'avons déjà rencontré dans le cas du modèle d'appariement à deux niveaux.

Pour aller plus loin, dans l'étude des corrélations dans la méthode SCRPA, nous envisageons maintenant d'analyser les résultats du calcul de la variance, qui est une quantité intimement liée aux corrélations. Tout d'abord, nous rappelons que, comme dans le calcul du nombre de boson dans l'état fondamental, nous ne pouvons pas calculer la variance dans la méthode RPA. Nous présentons donc uniquement les résultats de notre méthode et de la méthode du champ moyen. Les résultats sont ainsi représentés sur la figure (3.12). Dans cette figure nous constatons que l'amélioration apportée par notre méthode est très importante en comparaion avec la méthode champ moyen, dans n'importe quelle configuration considérée.

En ce qui concerne l'introduction des termes à deux bosons, nous avons remarqué que leurs introduction dans l'opérateur d'excitation RPA engendre un problème d'incohérence dans la méthode SCRPA. Nous rappelons que notre méthode repose sur deux idées principales : le choix de l'opérateur d'excitation RPA et son inversion. Pour résoudre le problème du mode spurieux, nous avons choisi un opérateur d'excitation RPA contenant des termes linéaires et quadratiques en bosons de la forme :

$$Q_\nu^\dagger = X_\nu t^+ - Y_\nu t^- + \lambda_\nu B^\dagger - \mu_\nu B + U_\nu \beta^\dagger \beta^\dagger - V_\nu \beta\beta, \quad \nu = 1,2,3. \tag{3.5}$$

Cependant, pour la mise en oeuvre de notre méthode nous devons inverser cet opérateur (par abus de langage on dit inverser l'opérateur, alors que cela signifie qu'on parle de l'inversion de la

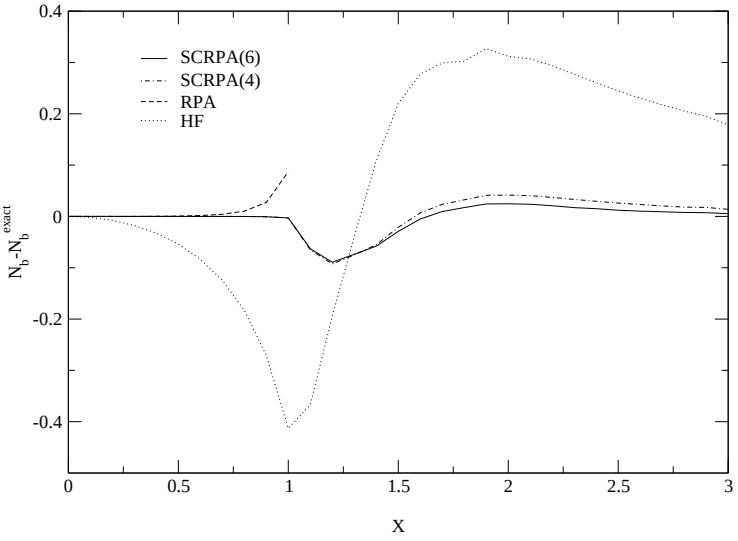

FIG. 3.11 – La différence $[N_b - N_b^{\text{exact}}]$, calculée avec les méthodes SCRPA(6), SCRPA(4), RPA standard et champ moyen, en fonction de la constante de couplage réduite x.

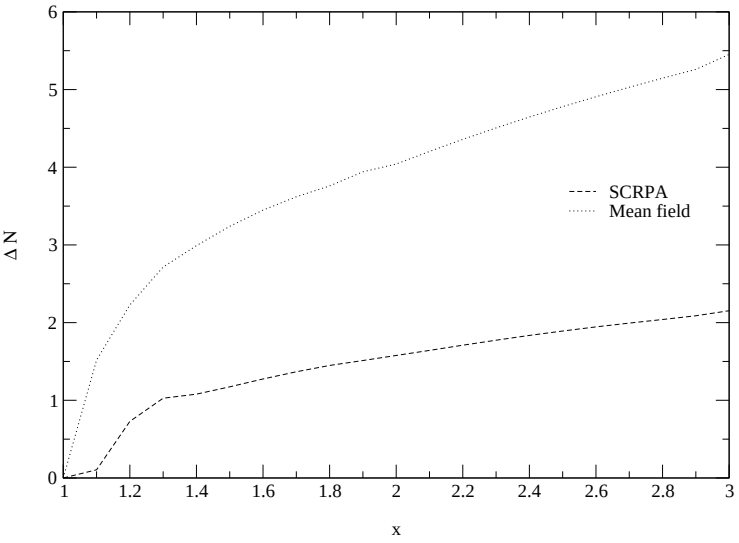

FIG. 3.12 – La variance de l'opérateur de symétrie P en fonction de la constante de couplage réduite x.

matrice de passage entre la matrice des opérateurs d'excitation RPA et celle de l'excitation du

système) comme suit :

$$\begin{pmatrix} t^- \\ B \\ \beta\beta \\ t^+ \\ B^\dagger \\ \beta^\dagger\beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & Y_1 & Y_2 & Y_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \\ U_1 & U_2 & U_3 & V_1 & V_2 & V_3 \\ Y_1 & Y_2 & Y_3 & X_1 & X_2 & X_3 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 & \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 \\ V_1 & V_2 & V_3 & U_1 & U_2 & U_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \\ Q_1^+ \\ Q_2^+ \\ Q_3^+ \end{pmatrix} . \tag{3.6}$$

Avec cette inversion et la définition de l'état fondamental RPA, nous pouvons montrer que les valeurs moyennes dans l'état RPA des opérateurs B et $\beta\beta$ sont nulles et cela induit un incohérence puisqu'on peut aussi calculer la valeur moyenne de $\beta\beta$ à l'aide de l'opérateur B. Le problème vient du fait que l'on doit supposer un découplage entre les termes à un boson et à deux bosons.

Pour résoudre le problème du mode spurieux, nous allons profiter des informations sur le modèle déjà obtenues précédemment. Nous envisageons de garder seulement les termes linéaires en bosons dans l'opérateur d'excitation RPA, (c'est-à-dire nous allons abandonner l'idée de l'introduction des termes quadratiques), mais au même temps nous devons améliorer la prise en compte de corrélations dans les états excitées. Pratiquement, nous comptons profiter des bons résultats obtenus dans le modèle de la séniorité (malgré sa simplicité) et introduire une autre contrainte qui fixe la valeur moyenne dans l'état fondamental RPA du carré de l'opérateur de symétrie P à sa valeur exacte. Pour information, nous avons essayé d'appliquer cette idée pour, améliorer nos résultats du modèle d'appariement à deux niveaux mais a cause des problèmes numériques, nous n'avons pas réussi à ce jour. Nous espérons l'appliquer dans ce modèle et résoudre le problème du mode spurieux de notre méthode.

3.3 Conclusion

Dans cette partie, nous avons étudié un modèle qui mélange fermions et bosons. Bien que la méthode SCRPA, comme nous l'avons signalé, permette une bonne description des propriétés physiques dans les systèmes fermioniques son application au modèle de D. Schütte et J. Da Providencia (SD77) s'avère un peu énigmatique. En effet, dans ce modèle la restauration de la symétrie P (différence entre le nombre des bosons et le nombre des fermions) qui est brisée spontanément au niveau de champ moyen, dans la méthode SCRPA en utilisant l'approximation de Cranking s'avère un peu difficile. Nous rappelons que, dans la référence (Ber98), la méthode SCRPA a été déjà appliquée à ce modèle en utilisant un opérateur d'excitation RPA linéaire en boson. Notre étude, en fait, constitue une extension de ce travail. Le but principal de notre étude été de résoudre le problème du mode spurieux qui est apparu lors de la première application. Afin de résoudre ce problème nous avons tenté d'améliorer l'opérateur d'excitation RPA, en incorporant des termes quadratiques en bosons de type BB.

Dans notre étude, que ce soit dans la région sphérique ou dans la région déformée, la méthode SCRPA à donné de très bons résultats pour l'énergie fondamentale en comparaison avec les méthodes HF, BCS et RPA. En effet, contrairement à la méthode RPA qui brise le principe variationnel de Ritz, une amélioration dans le calcul de la valeur moyenne de la densité à un corps dans l'état fondamental RPA, permet à la méthode SCRPA de respecter ce principe même au voisinage du point de transition. Nous rappelons aussi que dans la zone déformée, la valeur propre de haute énergie produite par la méthode SCRPA, comme celle produite par la RPA standard, s'identifie à l'énergie d'excitation exacte ΔE_L. De plus, dans la zone sphérique, cette valeur propre s'identifie à l'énergie d'excitation exacte ΔE_{+1}. En ce qui concerne ce mode, nous signalons que les deux méthodes SCRPA et RPA standard dans les deux régions du système produisent des résultats proches du calcul exact, sauf au voisinage du point de transition, où la méthode SCRPA apporte une légère amélioration. Nous notons aussi que dans la région déformée, la valeur propre de haute énergie de la méthode SCRPA s'identifie à l'énergie du premier état excité fondamental (qui peut être aussi interprété comme l'énergie d'excitation du système avec L bosons et fermions).

Venons en au problème du mode spurieux dans le modèle de Schütte et Da Providencia. Nous avons noté que notre méthode produit un résultat meilleur que celui produit par la méthode RPA standard. En effet, dans la région déformée, où la méthode RPA produit un mode de Goldstone, la méthode SCRPA, que ce soit avec des termes linéaires ou des termes quadratiques en bosons dans l'opérateur d'excitation RPA, produit une valeur propre non nulle. Cependant, bien que l'allure de ce mode suive grossièrement l'allure de l'énergie d'excitation exacte ΔE_{-1}, sa valeur est assez élevée, ce qui empêche son identification. Ainsi, le problème lié à l'identification de ce mode dans un calcul SCRPA subsiste et il doit être encore approfondi. En outre, nous savons que l'inclusion des termes quadratiques en bosons dans l'opérateur d'excitation RPA engendre une valeur propre supplémentaire dans le calcul SCRPA. Bien que dans la zone sphérique, nous avons remarqué que cette valeur propre s'identifie à l'énergie d'excitation exacte ΔE_{+2}, dans la zone déformée nous n'avons pas pu identifier cet état avec un état du spectre de la solution exacte. Par conséquent, pour ce modèle mélangeant bosons et fermions, au moins dans la phase avec symétrie brisée (phase Nambu-Goldstone), la théorie n'est pas encore suffisamment au point pour pouvoir prétendre de donner des résultats cohérents et de très bons qualités.

Quatrième partie

Conclusions générales

Conclusions générales

Le sujet de cette thèse se situe dans la continuité d'autres travaux sur l'extension et l'amélioration de la méthode RPA. En quelques mots, le problème est le suivant. La théorie RPA standard essaie de traiter des corrélations à deux corps. C'est une théorie qui est bien établie depuis pratiquement un demi-siècle. Cependant, elle présente quelques défauts qui dans certaines circonstances peuvent devenir assez fâcheux, entraînant ainsi une grande imprécision sur les résultats. Ces défauts résident essentiellement dans une violation du principe de Pauli car à un certain stade de la dérivation on remplace les valeurs moyennes par celles calculées dans le vide HF. C'est une inconsistance parce que la RPA dès le départ, est basée sur l'hypothèse de l'existence d'un état fondamental corrélé. Dans des travaux antérieurs on a réussi à corriger ce défaut en calculant les fonctions de corrélations avec un vide contenant déjà les corrélations RPA. Cela mène à des équations non linéaires auto-cohérentes qui ont été baptisées "Self-Consistent RPA (SCRPA)" et qui ont connu récemment de très bons succès dans la résolution de modèles du problème à N corps. Ceci a notamment été le cas récemment dans la résolution du modèle d'appariement multi-couches (DS99; HMDS02), qui est par ailleurs exactement soluble par la méthode de Richardson (Ric70) permettant ainsi de tester la qualité des résultats SCRPA. Cependant, on possède pour l'instant très peu d'expérience avec la SCRPA pour des systèmes qui se trouvent dans une phase avec symétrie spontanément brisée. Ceci est notamment le cas pour la phase superfluide ou supraconductrice de fermions en interaction. L'objectif de ce travail était de combler cette lacune. Comme on doit avancer à tâtons nous avons choisi un modèle suffisamment compliqué pour pouvoir tester la SCRPA dans la phase brisée avec toutes ses complications, mais en même temps suffisamment simple pour qu'une comparaison avec la solution exacte soit possible et pour que les calculs restent dans des dimensions bien contrôlables. Ce modèle est le modèle d'appariement à deux niveaux avec dégénérescence et remplissage quelconque. Pour ce faire, nous avons dû d'abord écrire le Hamiltonien en représentation de quasi-particules. Ensuite la SCRPA a été formulée avec ces quasi-particules (la SCQRPA) où les fonctions de corrélation entrent dans le noyau d'interaction (écrantage) si bien que la QRPA devient un problème non linéaire. Cette non linéarité peut être vue comme un champ moyen pour les fluctuations quantiques des paires, créé d'une manière self-consistante par toutes les fluctuations du point zéro existantes dans le système. Une fois les équations SCQRPA bien établies, la solution numérique des équations non-linéaires a été maîtrisée sans trop de difficultés. Les résultats représentent une très forte amélioration par rapport à la QRPA pour les énergies d'excitation, pour la variance du nombre de particules et pour les fonctions de corrélation en général ainsi que pour d'autres observables. Ces améliorations sont du même ordre que celles déjà rencontrées dans d'autres modèles ; ici cela a été démontré pour la première fois pour un système superfluide. Un tel système est notamment compliqué par la présence d'un mode de très basse énergie qui correspond au mode de Goldstone dans un système macroscopique. Cependant, la nature du mode à basse énergie a pu être identifié et son énergie correspond à deux fois la différence du potentiel chimique avec $N \pm 2$ particules où N est le nombre de particules considérées. On comprend bien que cette différence tende vers zéro lorsque N tend vers l'infini. Avec cette identification du mode "mou" la résolution self-consistante des équations a donc été maîtrisée et il est légitime de penser qu'une généralisation à des systèmes plus réalistes est désormais possible. On peut notamment penser au modèle d'appariement multi-couches déjà mentionné, dit "Picket Fence Model", qui a récemment connu un assez grand succès pour la description des petits grains métalliques supraconducteurs. L'avantage de la SCQRPA par rapport à

d'autres méthodes, comme la diagonalisation directe, ou l'application du groupe de renormalisation, ou encore des méthodes du type Monte Carlo, est que la SCQRPA donne directement accès aux fonctions de corrélations qui sont calculables aussi bien à température zéro qu'à température non nulle. Les résultats de notre travail nous rendent donc assez optimiste quant à la performance et l'applicabilité de la SCQRPA.

Dans un deuxième volet de cette thèse nous avons considéré un autre modèle précédemment étudié par T. Bertrand dans sa thèse (Ber98) mais qui laissait encore quelques questions en suspens. C'est un modèle schématique également à deux niveaux avec bosons et fermions en interaction. Dans ce modèle, l'interprétation du "mode de Goldstone" posait beaucoup de problèmes. Nous avons essayé d'améliorer les résultats en élargissant la SCRPA à des configurations à deux bosons. En fait, il s'est avéré que l'introduction de ces configurations à deux bosons n'a que marginalement amélioré la situation concernant le mode Goldstone et ceci reste pour l'instant un problème ouvert dans ce modèle. L'introduction de deux bosons a cependant permis de reproduire un état a haute énergie aussi présent dans la solution exacte.

En conclusion, nous pensons avoir apporté avec ce travail un ingrédient important dans l'établissement d'une SCRPA avec symétrie brisée. Nous pensons ainsi que nos résultats permettent de s'attaquer à des problèmes avec appariement beaucoup plus complexes que ceux traiter dans cette thèse.

Bibliographie

[AWP89] Ainsworth (T. L.), Wambach (J.) et Pines (D.), *Phys. Lett.*, vol. B222, 1989, p. 173.

[Bar70] Baranger (M.), « A definition of the single-nucleon potential », *Nucl. Phys.*, vol. A149, 1970, p. 225–240.

[BCS57] Bardeen (J.), Cooper (L. N.), et Schrieffer (J. R.), « Theory of superconductivity », *Phys. Rev.*, vol. 108, 1957, p. 1175–1204.

[Ber98] Bertrand (T.), « Approximation des phases aléatoires self-consistante appliquée à un modèle schématique de la théorie des champs », *Mémoire de thèse de l'Université Claude Bernard de Lyon-I*, n° LYCEN-T 98109, 1998.

[BET61] Browen (G. E.), Evans (J. A.) et Thouless (D. J.), *Nucl. Phys.*, vol. 24, 1961, p. 1.

[BM55] Bohr (A.) et Mottelson (B. R.), *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, vol. 30, n° 1, 1955.

[BP53] Bohm (D.) et Pines (D.), « A collective Description of Electron Interactions : III. Coulomb Interactions in a Degenerate Electron Gas », *Phys. Rev.*, vol. 92, 1953, p. 609.

[BR86] Blaizot (J.-P.) et Ripka (G.), *Quantum Theory of finite systems*. The MIT press, 1986.

[BSC+01] Bertrand (T.), Schuck (P.), Chanfray (G.), Aouissat (Z.) et Dukelsky (J.), « Self-Consistent Random Phase Approximation in a schematic field theoretical model », *Phys. Rev.*, vol. C63, 2001, p. 024301.

[CDS94] Catara (F.), Dinh Dang (N.) et Sambataro (M.), « Ground-state correlations beyond RPA », *Nucl. Phys. A*, vol. 579, 1994, p. 1–12.

[DDS] Delion (D. S.), Dukelsky (J.) et Schuck (P.), *To be published.*

[DDS+00] Delion (D. S.), Dukelsky (J.), Schuck (P.), de Passos (E. J. V.) et Krmpotic (F.), « Proton neutron Self-Consistent Quasiparticle Random Phase Approximation within the O(5) model », *Phys. Rev.*, vol. C62, 2000, p. 044311.

[Del01] von Delft (J.), *Ann. Phys. (Leipzig)*, vol. 10, 2001, p. 219.

[DHS00] Dukelsky (J.), Hirsch (J. G.) et Schuck (P.), « Occupation numbers in Self Consistent RPA », *Eur. Phys. J.*, vol. A7, 2000, p. 155–165.

[DRS98] Dukelsky (J.), Röpke (G.) et Schuck (P.), « Generalized Brückner-Hartree-Fock theory and self-consistent RPA », *Nucl. Phys. A*, vol. 628, 1998, p. 17–40.

[DS90] Dukelsky (J.) et Schuck (P.), « Towards a variational theory for RPA−like correlations and fluctuations », *Nucl. Phys.*, vol. A512, 1990, p. 466–482.

[DS91] Dukelsky (J.) et Schuck (P.), « Variational RPA approximation for the anharmonique oscillator », *Mod. Phys. Lett. A*, vol. 6, n° 26, 1991, p. 2429–2435.

[DS96] Dukelsky (J.) et Schuck (P.), « Self Consistent RPA for superfluid Fermi systems », *Phys. Lett. B*, vol. 387, 1996, p. 233–238.

[DS99] Dukelsky (J.) et Schuck (P.), « The Self Consistent RPA in a many level pairing model », *Phys. Lett.*, vol. B464, 1999, p. 164–168.

[Feu00] Feucht (B.), « Description self-consistante des fluctuations quantiques dans un modèle simple », *Rapport de stage de maîtrise de l'Université de Grenoble, sous la direction de P. Schuck (Institut des Sciences Nucléaires de Grenoble), disponible sur* `http ://www.bernd-feucht.de`, 2000.

[Foc30] Fock (V. A.), *Z. Phys.*, vol. 61, 1930, p. 126.

[GB96] Guet (C.) et Blundell (S.), *Surf. Rev. Lett*, vol. 3, 1996, p. 395.

[Har28] Hartree (D. R.), *Proc. Com. Phil. Soc.*, vol. 24, 1928, p. 89.

[HB00a] Hagino (K.) et Bertsch (G. F.), « Correlation energy of the pairing hamiltonian », *Nucl. Phys.*, vol. A679, 2000, p. 163–174.

[HB00b] Hagino (K.) et Bertsch (G. F.), « Rpa approach to rotational symmetry restoration in a three- level lipkin model », *Phys. Rev.*, vol. C61, 2000, p. 024307.

[HF61] Högaasen-Feldman (J.), *Nucl. Phys.*, vol. 28, 1961, p. 258.

[HMDS02] Hirsch (J. G.), Mariano (A.), Dukelsky (J.) et Schuck (P.), « Fully Self-consistent RPA description of the many level pairing model », *Annals Phys.*, vol. 296, 2002, p. 187–213.

[Joh70] Johns (O.), *Nucl. Phys.*, vol. A154, 1970, p. 65.

[KB62] Kadanoff (L. P.) et Baym (G.), *Quantum Statistical Mechanics*. Benjamin, New York, 1962.

[KPD+98] Krmpotic (F.), de Passos (E. J. V.), Delion (D. S.), Dukelsky (J.) et Schuck (P.), « Self-Consistent Random Phase Approximation within the O(5) model and fermi transitions », *Nucl. Phys.*, vol. A637, 1998, p. 295.

[Lan64] Lane (A. M.), *Nuclear Theory*. Benjamin, New York, 1964.

[Lip60] Lipkin (H. J.), *Ann. Phys. (New York)*, vol. 12, 1960, p. 425.

[LSZ01] Lombardo (U.), Schuck (P.) et Zuo (W.), *Phys. Rev.*, vol. C64, 2001, p. 021301.

[Nis76] Nishiyama (S.), *Prog. Theo. Phys.*, vol. 55, 1976, p. 1146.

[Nog64] Nogami (Y.), *Phys. Rev.*, vol. 134, 1964, p. B313.

[PTPK98] de Passos (E. J. V.), de Toledo Piza (A. F. R.) et Krmpotic (F.), « Self-Consistent and Renormalized particle-particle RPA in a Schematic Model », *Phys. Rev.*, vol. C58, 1998, p. 1841–1844.

[PY57] Peierls (R. E.) et Yoccoz (J.), *Proc. Phys. Soc.*, vol. A70, 1957, p. 381.

[RBCS02] Rabhi (A.), Bennaceur (R.), Chanfray (G.) et Schuck (P.), « Self-consistent quasi-particle rpa for the description of superfluid fermi systems », *Phys. Rev.*, vol. C66, 2002, p. 064315.

[Ric70] Richardson (R. W.), *Phys. Rev.*, vol. 141, 1970, p. 18.

[Row68] Rowe (D. J.), « Equations-of-motion method and the extended shell model », *Rev. Mod. Phys.*, vol. 40, 1968, p. 153–166.

[Row70] ROWE (D. J.), *Nuclear Collective Motion.* Methuen, London, 1970.

[RS80] RING (P.) et SHUCK (P.), *The nuclear many-body problem.* Springer-Verlag, 1980.

[SCBL96] SCHULZE (H. J.), CUGNON (J.), BALDO (M.) et LOMBARDO (U.), *Phys. Lett.*, vol. B375, 1996, p. 1.

[Sch86] SCHUCK (P.), « Traitement dynamique des symétries : Brisure et restauration », *Ecole Joliot-Curie de Physique Nucléaire*, 1986, p. 299–364.

[SD77] SCHÜTTE (D.) et DAPROVIDENCIA (J.), « A solvable model of boson condensation », *Nucl. Phys. A*, vol. 282, 1977, p. 518–532.

[SDD99] SAMBATARO (M.) et DING DANG (N.), « Variational approach to collective excitations », *Phys. Rev.*, vol. C59, 1999, p. 1422.

[SDR97] SCHUCK (P.), DUKELSKY (J.) et RÖPKE (G.), « The Dyson equation approach to many body Green's functions », *Lectures given at Hispalensis international summer school, Espana*, 1997.

[SY71] SCHALOW (G.) et YAMAMURA (M.), « Investigation of ground state correlations in an extended Lipkin-Meshkov-Glick model », *Nucl. Phys.*, vol. A 161, n° 93, 1971.

[Tho60] THOULESS (D. J.), *Nucl. Phys.*, vol. 21, 1960, p. 225.

[Yam74] YAMAMURA (M.), *Prog. Theo. Phys.*, vol. 52, 1974, p. 538.

Résumé

L'approximation de la phase aléatoire auto-cohérente (SCRPA) est une méthode qui permet d'inclure dans la théorie de champ moyen des corrélations dans l'état fondamental et les états excités. Elle constitue alors une méthode de type champ moyen pour les fluctuations quantiques. Elle a l'avantage de ne pas violer le principe de Pauli, contrairement à la RPA standard, qui, elle, est basée sur l'approximation dite de quasi-bosons. De plus, la SCRPA peut être formulée à partir d'un principe variationnel.

Nous présentons la méthode SCRPA pour la description de la superfluidité dans les systèmes de fermions en utilisant sa version Quasi-particule (SCQRPA). Une étude détaillée de la transition de phase normale/superfluide ainsi que une discussion du mode mou qui enclenche la brisure de symétrie nombre de particules sont présentées. Comme application, nous avons traité le modèle d'appariement à deux niveaux qui est un modèle exactement soluble. Des bons résultats sont obtenus en comparaison avec les résultats exacts. La nature du mode spurieux dans la SCQRPA est identifiée. Une forte réduction de la fluctuation du nombre total de particules dans la SCQRPA par rapport à la méthode BCS est établie. La transition de la phase superfluide à la phase normale est soigneusement étudiée. Une nouvelle méthode de calcul des nombres d'occupation est présentée.

Le succès de la méthode SCQRPA est aussi présent dans le cas d'un modèle mélangeant fermions et bosons tel que le modèle de Da-Providencia-Schütte. Il subsiste cependant un problème concernant le mode spurieux qui doit être encore approfondi.

Dans le cas du modèle de la séniorité, on montre que la méthode SCQRPA permet d'une manière naturelle de restaurer la symétrie (nombre de particules) brisée au niveau de l'approximation de champ moyen. Ceci est réalisé par l'introduction d'un second paramètre de Lagrange qui fixe la variance de l'opérateur de symétrie à zéro. Cette caractéristique importante de la méthode SCQRPA est signalée pour la première fois.

Mots-clés : Problème à N corps, Approximation de champ moyen, RPA, Quasi-particule RPA auto-cohérente, Superfluidité nucléaire, Restauration de symétrie, Transition de phase, Modèle d'appariement à deux niveaux, Modèle de la séniorité, Modèle boson-fermion de Da-Providencia-Schütte.

Abstract

The Self-consistent random phase approximation (SCRPA) is a method which allows to include in the mean field theory the correlations in the groundstate and the excited states. It then constitutes a method of the mean field type for quantum fluctuations. It has the advantage to respect the Pauli principle, contrary to the standard RPA which is based on an approximation known as quasi-bosons. Furthermore, the SCRPA can be formulated from a variationnal principle.

We present the SCRPA method for the description of superfluid Fermi systems by using its Quasi-particle version (SCQRPA). A detailed study of the transition from normal to superfluid phase as well as a discussion of the soft mode which generates breaking of the particle number symmetry are presented. As an application, we treat the two-level pairing model which is an exactly soluble model. Good results are obtained in comparison with the exact ones. The nature of the spurious mode in SCQRPA is identified. A strong reduction of the number fluctuation in the SCQRPA vs BCS method is established. The transition from superfluidity to the normal fluid phase is carefully studied. A new method for the calculation of the occupation numbers is presented.

The success of the SCQRPA method is also present in the case of a model which mixes fermions and bosons such as the Da-Providencia-Schütte model. There is however a problem concerning the spurious mode which should be still investigated.

In the case of the seniority model, one shows that the SCQRPA method allows in a natural way to restore a particle number symmetry spontaneously broken at the mean field level. This is achieved via the introduction of a second Lagrange parameter which constrains the variance of the symmetry operator to zero. This important feature of the SCQRPA method, is pointed out for the first time.

Keywords : Many-body problem, Mean-field approximation, RPA, Self-consistent Quasi-particle RPA, Nuclear superfluidity, Symmetry restoration, Phase transition, Two-level pairing model, Seniority model, Da-Providencia-Schütte boson-fermion model.