Gaz de bosons et de fermions condensés : phases de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov et quasicondensats

Christophe Mora

▶ **To cite this version:**

Christophe Mora. Gaz de bosons et de fermions condensés : phases de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov et quasicondensats. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2004. Français. NNT : . tel-00005472

HAL Id: tel-00005472

https://theses.hal.science/tel-00005472

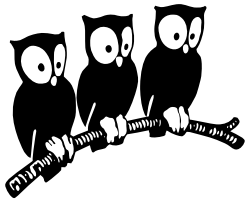
Submitted on 29 Mar 2004

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

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

Département de Physique De l'École Normale Supérieure

Laboratoire de Physique Statistique



Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI

présentée par

Christophe Mora

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

Spécialité : Physique Quantique

Sujet de la thèse

Gaz de bosons et de fermions condensés : phases de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov et quasicondensats

Soutenue le 1er mars 2004 devant le jury composé de :

Claude Aslangul	**Président du Jury**
Roland Combescot	**Directeur**
Yvan Castin	**Co-directeur**
Maxim Ol'shanii	**Rapporteur**
Dierk Rainer	**Rapporteur**
Antony J. Leggett	**Examinateur**
Alexander Buzdin	**Invité**
Gora Shlyapnikov	**Invité**

À Tchoum ...

Remerciements

Voici donc la page vraisemblablement la plus lue de cette thèse, celle des remerciements. Après trois ans (voire plus) passés au Laboratoire de Physique Statistique de l'ENS, il va sans dire que la liste est longue. En premier lieu, je tiens bien sûr à remercier Jacques Meunier de m'avoir accueilli au LPS.

Je souhaite remercier très chaleureusement mon directeur de thèse Roland Combescot avec lequel j'ai pu mener une recherche rigoureuse et constructive. J'ai beaucoup appris en discutant avec lui et son encadrement pendant la thèse a vraiment été parfait. Ses connaissances dans de nombreux domaines de la physique m'ont beaucoup aidé pendant ma thèse dont les thématiques ont oscillé entre supraconductivité et physique des atomes froids.

Un grand merci aussi à mon second directeur de thèse Yvan Castin. Tous ceux qui ont travaillé avec lui savent à quel point on apprend à son contact. J'ai pu bénéficier au cours de nos nombreuses et fructueuses discussions de sa compréhension profonde des phénomènes liée à une grande rigueur scientifique.

Je veux aussi remercier Xavier Leyronas pour les nombreuses discussions que nous avons eues, ainsi que pour sa gentillesse, sa patience et sa bonne humeur. Discuter avec lui fut toujours un plaisir même s'il est parfois un peu moqueur (Hamster J.).

Je suis aussi redevable à nombre de personnes pour les bonnes conditions dans lesquelles j'ai pu travailler. Je remercie donc Nora et Carole pour le secrétariat du LPS, Daniel Le Moal et Rémy Portier pour le service informatique ainsi que tout le personnel encadrant de l'ENS.

J'ai eu la chance d'avoir un jury de grande qualité scientifique. Merci donc à ses membres Claude Aslangul, Gora Shlyapnikov et Alexander Buzdin ainsi qu'aux rapporteurs Maxim Ol'shanii et Dierk Rainer. Merci notamment à ceux qui ont fait le déplacement depuis l'étranger. Je souhaite adresser des remerciements particuliers à Antony Leggett qui a accepté de faire partie de ce jury malgré une actualité chargée.

Mon travail de thèse a été mené dans un environnement très convivial et intellectuellement très stimulant. Je voudrais donc remercier tous ceux que j'ai côtoyé pendant ma thèse, ceux avec qui j'ai eu des discussions, qu'elles soient scientifiques ou non. Merci à Jean Farago, Stéphane Fauve, François Pétrélis, Sébastien Moulinet, Mathieu Poujade, Werner Krauth, Philippe Cren, Frédéric Caupin, Agnès Huynh, Jérome Tignon, Sébastien Aumaître, David Guéry-Odelin, Jean-Noël Fuchs, Dimitri Gangardt, Carlos Lobo, Iacopo Carusotto, Ludovic Pricoupenko, Lincoln Carr, Frédéric Chevy, mes complices de DEA Vincent Bretin et Julien Cubizolles, Benoît Douçot, Bernard Roulet, Alain Comtet, Anna Minguzzi,

Markus Holtzmann, Mokhtar Adda-Bedia, Jean Vannimenus, Bernard Derrida, Vincent Hakim et Guilhem Semerjian.

Je dois aussi beaucoup à tous ceux dont j'ai partagé le bureau en Dc21. Il y règne une saine ambiance machiste et l'atmosphère y est chaleureuse et toujours propice au travail. Merci donc à Arezki Boudaoud, Éric Brunet, Hervé Henry, Caroline Nore, Alberto Rosso, Romain Thomas, Samuel Marque, Éric Sultan, Jean-Marc Allain, Paul François, Camille Enaud et Cyril Cichowlas.

Je souhaite remercier particulièrement Chi-Tuong Pham qui a été mon compagnon de route en Dc21. Nous avons partagé ensemble des joies et des déceptions et je me demande parfois si l'esprit de la Dc21 lui survivra. Merci aussi pour ses nombreux cours de Latex.

Je remercie finalement ceux qui m'ont entouré pendant ce travail, mes amis, mes parents et mon frère Thierry. Merci à ma femme Sophie, pour son soutien quotidien et pour bien d'autres choses.

Liste des symboles utilisés dans cette thèse

Général

- μ : potentiel chimique.
- a : longueur de diffusion en *onde s* d'un potentiel interatomique.
- $\beta = 1/T$: inverse de la température.

Première partie

- $\mu_{\uparrow,\downarrow}$: potentiels chimiques des spins $\uparrow$ et $\downarrow$.
- $\bar{\mu} = (\mu_\uparrow - \mu\downarrow)/2$: demi-différence des potentiels chimiques.
- ω_c : fréquence typique de phonons, de l'ordre de la fréquence de Debye.
- T_c^0 : température critique de transition BCS lorsque $\bar{\mu} = 0$.
  $\rightarrow$ cette température est notée T_c dans les sections 4.2 et 4.3.
- ϵ_F (k_F) : énergie (vecteur d'onde) de Fermi, $\mu = \epsilon_F = \hbar^2 k_F^2/2m$.
- $\lambda_F = 2\pi/k_F$: longueur d'onde de Fermi.
- $v_F = \hbar k_F/m$: vitesse de Fermi.
- $N_0 = mk_F/2\pi^2\hbar^2$: densité d'état à l'énergie de Fermi.
- $C = 0.57721\ldots$: constante d'Euler.
- $\Delta_0 = (\pi/e^C)T_c^0$: gap à température nulle de l'état condensée BCS.
- $\xi_0 = \hbar v_F/\pi\Delta_0$: longueur de cohérence BCS.
- μ_B : magnéton de Bohr.
- ℓ : libre parcours moyen.
- H_{c2} : champ magnétique critique à partir duquel la supraconductivité est détruite.
- H_P : champ de Pauli.
- g : constante d'interaction dans le modèle BCS ($\lambda = N_0 g$).
- $\bar{q} = \hbar v_F|\mathbf{q}|/2\bar{\mu}$: norme du vecteur d'onde $\mathbf{q}$ en unité réduite.
- T_c ($\bar{\mu}_c$) : température (demi-différence des potentiels chimiques) du point tricritique.
- $\Delta(\mathbf{r})$: paramètre d'ordre de la phase condensée.
- F : énergie libre du système.
- Ω : différence d'énergie libre entre l'état condensé et l'état normal.
- $\hat{\mathbf{k}}$ ($\hat{\mathbf{q}}$) : vecteur unitaire donnant la direction du vecteur $\mathbf{k}$ ($\mathbf{q}$).
- $\xi_{\mathbf{k}} = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m - \mu$ (noté aussi ξ) : énergie d'une excitation de vecteur d'onde $\mathbf{k}$.
- $\sigma_{x,y,z}$: matrices de Pauli dans l'espace de spin $s = 1/2$.
- $\omega_n = \pi T(2n+1), n \in \mathbb{Z}$: fréquences de Matsubara, $\bar{\omega}_n = \omega_n - i\bar{\mu}$.
- $\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n)$ ($\mathcal{F}$ et $\mathcal{F}^+$) : fonction(s) de Green normale (et anormales) ; matrices 2×2 dans l'espace de spin $s = 1/2$.

• $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - \bar{\mu}\sigma_z)^{-1}$: fonction de Green normale pour des fermions libres (état normal).

• $G_\uparrow(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{G}_{\uparrow,\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n)$, $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}) = \mathcal{G}_{0_{\uparrow,\uparrow}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n)$, $\bar{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}) = \mathcal{G}_{0_{\downarrow,\downarrow}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', -i\omega_n)$ et $F^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{F}^+_{\downarrow,\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n)$.

• $\tilde{F}$, $\tilde{\Delta}$ et $\tilde{\mathbf{q}}$: paramètres réduits au voisinage du point tricritique.

• $A_0(\bar{\mu}, T)$ mesure de la distance à la ligne spinodale valable au voisinage du point tricritique.

• N : nombre d'ondes planes dans la forme du paramètre d'ordre.

• β : paramètre dépendant de la forme du paramètre d'ordre au voisinage du point tricritique ($\alpha = (2 + \beta)/3$).

• $t = T/\bar{\mu}$: température réduite.

• $\bar{t} = t/\bar{q}$: autre température réduite.

• $a \equiv (\bar{q} - 1)/2t$ et $\beta^2 \equiv (1 - \cos(\alpha/2))/\bar{t}$.

• $\mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$: centre de masse des paires de Cooper.

• $u = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$: coordonnée relative.

• g (f et f^+) : fonction de Green quasiclassique normale (anormales).

Seconde partie

• ℓ : pas du réseau.

• $\epsilon_{1,2}$: petit paramètre du développement perturbatif.

• $\xi = \hbar/\sqrt{m\mu}$: longueur de relaxation.

• $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_BT}$: longueur d'onde de de Broglie.

• d : dimension de l'espace.

• $\hat{\psi}(\mathbf{r})$: champ atomique.

• $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ ($\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})$) : opérateur donnant la densité (les fluctuations de densité).

• ρ : densité moyenne.

• $\hat{\theta}(\mathbf{r})$: opérateur donnant la phase.

• $U(\mathbf{r})$: potentiel extérieur (piège).

• $\rho_0(\mathbf{r})$: densité du gaz à l'ordre le plus bas de la théorie, $N_0 \equiv \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \rho_0(\mathbf{r})$.

• $\phi_0(\mathbf{r}) \equiv \sqrt{\rho_0(\mathbf{r})/N_0}$.

• $\hat{P}$: opérateur donnant les fluctuations du nombre total d'atomes.

• $\hat{Q}$: opérateur correspondant à une phase globale collective.

• g : constante de couplage correspondant à un potentiel de contact à 1D, $g \equiv 4\pi\hbar^2 a/m$ à 3D.

• $\hat{B} \equiv \delta\hat{\rho}/2\sqrt{\rho_0} + i\sqrt{\rho_0}\,\hat{\theta}$.

• $\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) \equiv (1 - |\phi_0\rangle\langle\phi_0|)\left(\hat{B}(\mathbf{r}) + i\sqrt{N_0}\hat{Q}\phi_0(\mathbf{r}) - 1/\sqrt{N_0}\hat{P}\phi_a(\mathbf{r})\right)$.

• $\ell_c = \rho\lambda^2/\pi$: longueur de cohérence de phase à 1D.

Table des matières

I Phases de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov **13**

Introduction **15**

1 Cadre théorique et expériences **17**
1.1 Fermions en interaction faible 17
1.1.1 La théorie BCS 17
1.1.2 Hamiltonien modèle de la théorie BCS 19
1.2 Situations expérimentales 20
1.2.1 Effets paramagnétique et orbital dans les supraconducteurs 20
1.2.2 Gaz d'atomes fermioniques à très basse température 24
1.3 Instabilité BCS dans la phase normale 26
1.3.1 Pôle de la fonction de corrélation de paires 26
Encadré 1 : propagateur de paires et instabilité 28
1.3.2 Etude de l'équation donnant l'instabilité 29
1.3.3 Diagramme dans le plan $(\bar{\mu}, T)$ 34
1.4 Discussion physique des phases FFLO 36
1.4.1 Couplage des surfaces de Fermi 36
1.4.2 Compétition énergétique 38
1.5 Conclusions 39

2 Traitement BCS de la phase condensée **41**
2.1 Formalisme BCS d'Eilenberger 42
2.1.1 Liquides de Fermi 42
Encadré 2 : Minimisation de l'énergie libre 44
2.1.2 Hamiltonien effectif BCS 45
2.1.3 Diagonalisation de h 46
2.2 Traitement de cas simples 47
2.2.1 Solution homogène 48
Encadré 3 : Théorie de Landau des transition de phase 49
2.2.2 État de Fulde-Ferrell 52
2.2.3 Formes plus complexes du paramètre d'ordre 53
2.3 Équations de Gorkov 54
2.3.1 Établissement des équations 54
2.3.2 Forme intégrale 57
2.4 Énergie de Ginzburg-Landau généralisée 58

2.4.1 Développement de l'équation du gap . . . 58
2.4.2 Etude au voisinage d'une transition du second ordre . . . 59
2.4.3 Équation de Ginzburg-Landau généralisée . . . 60
2.5 Conclusions . . . 63

3 Résultats analytiques 65
3.1 Voisinage du point tricritique . . . 65
3.1.1 Cas simples . . . 66
3.1.2 Sous-espace LO . . . 67
3.1.3 Au-delà du sous-espace LO . . . 71
3.1.4 Conclusions et perspectives à plus basses températures . . . 74
3.2 Cascade à deux dimensions . . . 75
3.2.1 Terme d'ordre 2 . . . 77
3.2.2 Terme d'ordre 4 . . . 78
3.2.3 Arguments simples expliquant la cascade . . . 83
3.2.4 Minimisation de l'énergie . . . 84
Encadré 4 : structures symétriques . . . 85
3.2.5 Comportements asymptotiques . . . 88
3.2.6 Conclusions . . . 91
3.3 Appariements indépendants . . . 93
3.3.1 Forme de l'appariement pour l'onde plane de Fulde-Ferrell . 93
3.3.2 Cascade à 2D . . . 96

4 Résultats numériques 99
4.1 Formalisme quasiclassique . . . 100
4.1.1 Approximation quasiclassique . . . 100
4.1.2 Équations quasiclassiques . . . 100
Encadré 5 : Symétries des fonctions de Green . . . 104
4.1.3 Formalisme plus général . . . 104
4.1.4 Nouvelles expressions quasiclassiques . . . 105
4.1.5 Normalisation et conclusion . . . 106
Encadré 6 :Normalisation des fonctions de Green quasiclassiques . 107
4.2 Développement de Fourier des équations quasiclassiques . . . 107
4.2.1 Paramètre d'ordre sinusoïdal . . . 108
4.2.2 Convergence de la méthode . . . 110
4.2.3 Ajout d'une harmonique au paramètre d'ordre . . . 113
4.2.4 Conclusion . . . 114
4.3 Somme de cosinus dans deux, trois ou quatre directions . . . 116
4.3.1 Formalisme pour deux cosinus . . . 116
4.3.2 Résultats pour deux cosinus . . . 118
4.3.3 Formalisme et résultats pour trois cosinus . . . 121
4.3.4 Somme de quatre cosinus . . . 124
4.4 Compétition entre phases à basse température . . . 126
4.4.1 Solutions approchées avec $N_{\max} = 1$ . . . 126
4.4.2 Appariement sur la sphère de Fermi . . . 128
4.5 Conclusion . . . 129

Conclusions et perspectives **131**

A Développement de l'énergie libre **133**

B $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$ à 2D **137**
B.1 Calcul de $J(\alpha)$ . . . 137
B.2 Calcul de $\tilde{J}(\alpha)$ . . . 138

II Extension de la théorie de Bogoliubov **141**

Introduction **143**

1 Modèle sur réseau **149**
1.1 Principe d'un modèle sur réseau . . . 149
1.1.1 Discrétisation de l'espace . . . 149
1.1.2 Discrétisation des opérateurs . . . 151
1.2 Nécessité d'une approche sur réseau . . . 152
1.2.1 Fluctuations de densité . . . 152
1.2.2 Définition d'un opérateur donnant la phase . . . 153
1.3 Diffusion sur une grille . . . 155
1.3.1 Pseudopotentiels . . . 155
1.3.2 Détermination de g_0 . . . 156
Encadré 1 : Théorie formelle des collisions . . . 157
1.4 Domaine de validité de notre approche . . . 159
1.5 Conclusion . . . 162

2 Développement perturbatif de l'hamiltonien **163**
2.1 Résolution perturbative ordre par ordre . . . 164
2.1.1 Développement de l'hamiltonien . . . 164
2.1.2 Ordre zéro . . . 165
2.1.3 Transformation de Bogoliubov . . . 166
Encadré 2 : Lien avec l'approche de Bogoliubov . . . 168
2.1.4 Terme cubique . . . 170
2.2 Calcul des observables . . . 171
2.2.1 Équation d'état . . . 172
2.2.2 Énergie de l'état fondamental . . . 173
2.2.3 Fonction de corrélation du second ordre . . . 173
2.2.4 Fonction de corrélation du premier ordre . . . 174
Encadré 3 : Utilisation du théorème de Wick . . . 175
2.3 Application au gaz homogène . . . 177
2.3.1 Équation d'état . . . 177
2.3.2 Fonction $g_1(r)$ . . . 179
2.3.3 Calcul plus complet à 1D . . . 180
2.3.4 Comportements asymptotiques . . . 183
2.4 Conclusion . . . 184

Conclusions et perspectives **187**

A Développements asymptotiques de $g_1(r)$ à 1D **189**
A.1 Limite à grand r pour $T = 0$ 189
A.2 Limite à grand p de $\Pi(p)$ 190
A.3 Comportement limites de K 191

Bibliographie **194**

Publications : **203**

I Transition to FFLO phases near the tricritical point ... **205**

II Extension of Bogoliubov theory to quasicondensates **217**

Première partie

Phases de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov

Introduction

Le sujet de la première partie de cette thèse est parti d'une interrogation très pratique concernant les récentes expériences d'atomes froids dans des gaz de fermions. On est aujourd'hui très près dans ces expériences d'obtenir un condensat de paires de Cooper, ou condensat BCS, chaque paire étant formée d'atomes dans deux niveaux hyperfins différents. La question était donc de savoir quel serait l'effet d'une différence dans les populations des deux niveaux hyperfins sur la formation du condensat BCS.

C'est un problème expérimental aussi bien que théorique puisqu'il n'est pas certain qu'on puisse égaliser avec suffisamment de précision ces deux populations spinorielles. Avant de considérer le problème dans sa globalité, nous l'avons simplifié en considérant le cas d'un espace homogène, c'est-à-dire sans piège extérieur, et nous nous sommes placés dans le cadre de la théorie BCS [1]. Nous chercherons dans cette thèse à préciser les conditions de validité d'un tel choix.

Finalement la question théorique s'est transformée en : que devient la théorie BCS pour des populations de spin différentes ou encore pour des potentiels chimiques des populations spinorielles différents ? Bien entendu la différence de populations des spins est défavorable à la formation d'un condensat BCS puisque la formation des paires de Cooper tend à apparier les fermions tandis que l'effet d'une différence de potentiels chimiques est de polariser le gaz de fermions. Les phases de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov, ou phases FFLO, apparaissent alors comme une adaptation de la phase condensée qui lui permet de soulager la contrainte sur la polarisation des spins. Ces phases brisent la symétrie d'invariance par translation car elles donnent un paramètre d'ordre inhomogène.

Cette problématique est en fait connue et étudiée depuis 1964 et les articles indépendants de Fulde et Ferrell [2], et de Larkin et Ovchinnikov [3], dans le cadre de la physique des supraconducteurs. Aujourd'hui, aucune expérience n'a conclu de façon indiscutable sur la présence de telles phases dans des matériaux supraconducteurs. Depuis peu, il semble que la présence de phases inhomogènes soit aussi envisagée dans les étoiles à neutrons très denses où on pourrait avoir un appariement, de type paire de Cooper, entre des quarks de masses différentes [4]. Dans ce contexte, on parle plutôt de phases LOFF mais l'ordre des lettres n'a aucune incidence sur la physique décrite qui est la même que pour les supraconducteurs ou pour les gaz froids. Il n'est pas vraiment étonnant que la thématique des phases FFLO soit ainsi à cheval entre plusieurs domaines de la physique puisqu'il s'agit finalement d'un aspect assez fondamental de la superfluidité des fermions.

Cette première partie est organisée selon quatre chapitres.

Dans le premier chapitre, on introduit en détail la théorie BCS ainsi que les conditions expérimentales dans lesquelles on pourrait observer les phases FFLO, aussi bien dans les supraconducteurs que dans les gaz d'atomes froids. On étudie ensuite, dans l'approximation de resommation des échelles, l'apparition de l'état lié des paires de Cooper qui correspond à une instabilité de l'état normal conduisant à un condensat BCS. On montre qu'au-delà d'un point dit tricritique, les paires de Cooper sont formées avec un moment total non nul ce qui est une caractéristique des phases inhomogènes FFLO. On essaie finalement d'expliquer de façon plus physique les raisons de l'apparition de ces phases FFLO.

La description théorique de la phase condensée dans le cadre de la théorie BCS est présentée dans le second chapitre. On utilise une reformulation de la théorie BCS due à Eilenberger qui est assez commode pour concilier celle-ci avec la théorie de Landau des liquides de Fermi. On dérive ensuite les équations de Gorkov, équations à partir desquelles on obtient deux développements analytiques de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre. Le premier des développements est valable au voisinage d'une transition du second ordre. Le second n'est valable qu'au voisinage du point tricritique mais il s'applique aussi bien à une transition du premier ordre qu'à une transition du second ordre.

Le troisième chapitre regroupe les études analytiques de cette thèse sur les phases FFLO. On utilise nos deux développements de l'énergie dans une approche de type Ginzburg-Landau. On peut ainsi étudier la compétition entre les différentes formes inhomogènes du paramètre d'ordre. On commence par regarder le voisinage du point tricritique où on détermine l'ordre de la transition ainsi que les phases de plus basse énergie. A 2D où la transition est du second ordre, on s'intéresse ensuite à la compétition entre phases au voisinage de cette transition et à toute température. On montre la présence d'une cascade d'une infinité de transitions entre différentes formes du paramètre d'ordre lorsque la température tend vers zéro. Pour finir, on justifie l'existence de cette cascade à l'aide d'arguments beaucoup plus heuristiques.

L'étude de la transition entre l'état normal et les phases FFLO à 3D et à toute température est l'objet du quatrième chapitre. Ce problème est plus délicat car la transition est du premier ordre et on ne connait pas d'approche analytique pour le traiter. Nous présentons donc une méthode numérique que nous avons mise au point et qui nous permet de calculer les caractéristiques d'un grand nombre de phases inhomogènes. Cette méthode est basée sur un développement de Fourier des équations quasiclassiques d'Eilenberger. On commence donc par dériver ces équations à partir des équations de Gorkov puis on explique le principe de notre méthode numérique avant de l'appliquer à l'étude de la compétition entre phases inhomogènes à toute température.

Chapitre 1

Cadre théorique et expériences

1.1 Fermions en interaction faible

1.1.1 La théorie BCS

En 1957, Bardeen, Cooper et Schrieffer [1] proposent une théorie pour expliquer le phénomène de la supraconductivité. Après de nombreux succès dans la comparaison entre les prédictions de cette théorie BCS et les mesures expérimentales faites dans les supraconducteurs, celle-ci s'impose peu à peu comme un cadre général à l'étude des supraconducteurs. On sait aujourd'hui que de nombreux autres arguments théoriques viennent conforter la généralité de la théorie BCS même si l'on a depuis découvert d'autres classes de supraconducteurs (comme les supraconducteurs à haute température critique) pour lesquels son application n'est pas évidente. Le principe de cette théorie vient d'un argument avancé par Cooper [5] : deux fermions interagissant de façon attractive en présence d'une mer de Fermi, c'est-à-dire en présence d'autres fermions, tendent à former un état lié ou une *paire de Cooper* aussi faible que soit l'interaction. Le caractère bosonique des paires de Cooper conduit à l'apparition d'un état condensé cohérent à l'instar d'un condensat de Bose-Einstein. L'argument de Cooper conduit donc à prédire une instabilité à température nulle de l'état dit *normal*, c'est-à-dire un état où les fermions sont presque libres, menant à un état condensé où le système est décrit par une fonction d'onde macroscopique cohérente. Cette cohérence est à l'origine du phénomène de la supraconductivité. Partant de ce constat, Bardeen, Cooper et Schrieffer ont cherché à décrire l'état condensé du système à l'aide d'une fonction d'onde variationnelle dans l'esprit d'une théorie de champ moyen. Dans cette théorie, les excitations thermiques s'interprètent simplement comme des brisures de paires de Cooper. On peut ainsi prédire, dans le cadre de la théorie BCS, une température critique de transition entre l'état normal et l'état condensé qui n'est valable que pour une interaction faible entre les fermions. Dans ce cas, la température critique est petite devant la température de dégénérescence quantique, ici la température de Fermi T_F. C'est notamment le cas dans la plupart des supraconducteurs. Ceci a par ailleurs une incidence sur la forme de l'état condensé. Les paires de Cooper sont faiblement liées et leur taille est beaucoup plus grande que la distance typique entre fermions. Ainsi le condensat n'est pas un conden-

sat de Bose de paires de Cooper bien distinctes mais est plutôt formé par un enchevêtrement de paires de Cooper.

Le lien de cette théorie avec la réalité physique des supraconducteurs n'est pas évident au premier abord. Les électrons sont bien des fermions mais ils interagissent fortement entre eux *via* l'interaction coulombienne répulsive. Et on ne sait pas traiter exactement ce problème. La théorie de Landau [6] des liquides de Fermi indique cependant les raisons qui justifient l'approche de Bardeen, Cooper et Schrieffer. Dans cette théorie, on ne raisonne plus en termes d'électrons mais d'excitations fermioniques (ou de *quasiparticules*) par rapport à une sphère de Fermi qui correspond à l'état fondamental du système à température nulle. Cela signifie notamment que l'on suppose que les fortes interactions ne modifient pas le concept de surface de Fermi. L'image que l'on donne de ces quasiparticules est celle d'électrons *habillés* par leurs interactions avec les autres électrons. La forte interaction coulombienne est ainsi écrantée par cet habillage conduisant à une faible interaction effective entre quasiparticules. Ces quasiparticules sont cependant différentes des vraies particules. Les fortes interactions leur donnent un temps de vie fini, d'autant plus long cependant que les vecteurs d'onde des quasiparticules sont proches de la surface de Fermi. Or ce sont justement ces vecteurs d'onde qui sont principalement mis en jeu dans le mécanisme d'appariement des fermions en paires de Cooper. En conséquence, pour des températures petites devant la température de Fermi T_F, il est légitime de traiter le gaz d'électrons comme un gaz de fermions libres.

Il reste à déterminer d'où provient l'interaction attractive entre fermions. Le mécanisme le plus vraisemblable a été proposé par Fröhlich [7] : l'interaction effective attractive se fait *via* le couplage des électrons avec les vibrations du réseau, c'est-à-dire *via* l'interaction électron-phonon. Cette interaction effective est faible dans la plupart des supraconducteurs comme on le suppose dans la théorie BCS. Toutefois, le mécanisme de couplage entre électrons ne donne une interaction attractive que pour des énergies inférieures à l'énergie de coupure $\hbar\omega_c$, ω_c étant de l'ordre de la fréquence de Debye du réseau cristallin. La restriction dans la théorie BCS aux énergies inférieures à cette énergie de coupure $\hbar\omega_c$ et pour laquelle l'interaction effective est attractive, est cohérente avec la théorie des quasiparticules de Landau car l'énergie $\hbar\omega_c$ est beaucoup plus petite que la température de Fermi T_F dans la plupart des matériaux supraconducteurs. Les énergies intervenant dans le mécanisme BCS se situent donc au voisinage de la surface de Fermi, dans une couche d'épaisseur $\hbar\omega_c$.

Ces différents arguments expliquent le succès de la théorie BCS pour décrire la condensation de paires dans les supraconducteurs. En particulier, l'enchevêtrement des paires de Cooper est propice au traitement en champ moyen de la théorie BCS.

Notons que depuis l'article de Bardeen, Cooper et Schrieffer, le formalisme de la théorie BCS a été complété ou présenté de façon plus efficace. Les équations de Gorkov [8] sont équivalentes à l'approche BCS et elles permettent de faire le lien avec les équations phénoménologiques de Ginzburg-Landau en leur donnant une dérivation microscopique. Dans la théorie BCS, l'interaction entre fermions est considérée comme instantanée. On obtient la théorie dite de couplage fort

d'Eliashberg [9] en incluant les effets de retard de l'interaction entre électrons *via* le couplage avec le réseau. De même, on peut inclure dans le traitement théorique les effets des liquides de Fermi [10].

1.1.2 Hamiltonien modèle de la théorie BCS

Nous avons vu au paragraphe précédent l'intérêt de la théorie BCS pour décrire la supraconductivité. Ce sera le cadre principal de la première partie de cette thèse dont nous allons préciser ici les contours théoriques. Les électrons sont des fermions de spin $s = 1/2$. Le milieu est considéré comme homogène et sans impuretés. On décrit les électrons à l'aide de l'hamiltonien simplifié suivant :

$$H = H_0 + H_I \tag{1.1}$$

avec

$$H_0 = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_\sigma) \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} \tag{1.2}$$

$$H_I = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'} \hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma} \hat{a}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} \tag{1.3}$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ est l'énergie d'un fermion libre, $\uparrow$ et $\downarrow$ désignent les deux états de spin, $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ ($\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$) est l'opérateur qui détruit (crée) un fermion dans le mode d'impulsion $\mathbf{k}$ et de spin σ. L'hamiltonien H_0 décrit un gaz de fermions libres, celui-ci est ensuite perturbé par H_I. Les potentiels chimiques $\mu_\uparrow \equiv \mu + \bar{\mu}$ et $\mu_\downarrow \equiv \mu - \bar{\mu}$ définissent les positions des deux surfaces de Fermi. A l'échelle de μ et de $\hbar\omega_c$, les surfaces de Fermi sont très proches, c'est-à-dire qu'on a la hiérarchie suivante : $\bar{\mu} \ll \hbar\omega_c \ll \mu$. On définit ainsi k_F par $\mu \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m$, ce qui donne la position moyenne de la surface de Fermi dans l'espace des vecteurs d'onde. La différence de potentiel chimique entre les deux espèces spinorielles crée une contrainte défavorable à la formation de la phase supraconductrice qui est à l'origine de l'apparition des phases FFLO. Cette contrainte énergétique défavorable à l'état condensé est de l'ordre de $\bar{\mu}$ qui doit donc rester de l'ordre (ou plus petit) que l'énergie typique de condensation des paires de Cooper $k_B T_c^0$, où T_c^0 désigne la température critique de transition lorsque $\mu_\uparrow = \mu_\downarrow$. Au-delà de cette différence d'énergie entre les deux surfaces de Fermi, l'état condensé ne peut vraisemblablement plus exister.

Les fermions de l'hamiltonien (1.1) sont très souvent identifiés aux électrons du métal même si l'on sait bien, dans le cadre de la théorie de Landau, que ces fermions sont en fait des quasiparticules définis proprement uniquement au voisinage de la surface de Fermi. L'hamiltonien simplifié (1.1) n'est donc valable que pour décrire les excitations d'impulsion *proches* de k_F.

Le potentiel d'interaction $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'}$ a généralement une forme complexe qui dépend des interactions avec les phonons ainsi que des interactions directes électrostatiques. Dans le modèle BCS, on simplifie la forme du potentiel en ne conservant que la partie attractive induite par le couplage électron-phonon qui est physiquement à l'origine de la condensation BCS. Le potentiel est donc restreint à la couche d'épaisseur $2\hbar\omega_c$ autour de la surface de Fermi, c'est-à-dire qu'il est nul pour des

énergies d'excitation $|\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_c$, où $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. Par ailleurs, dans le modèle BCS le plus simple, on suppose que l'état des paires de Cooper est en *onde s*, ce qui signifie en pratique que le potentiel d'interaction peut être pris indépendant de l'angle entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$. Le postulat d'antisymétrisation de la fonction d'onde totale de deux fermions implique notamment que les fermions de même spin ne sont pas couplés par une telle interaction. On suppose en outre que la variation du potentiel en fonction des modules de $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ est suffisamment faible pour qu'on prenne une valeur constante pour le potentiel. En résumé, le potentiel a la forme suivante :

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'} = \begin{cases} -g\delta_{\sigma,-\sigma'} & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}|,|\xi_{\mathbf{k}'}| < \hbar\omega_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{1.4}$$

Dans la théorie BCS, l'interaction effective est faible ce qui signifie que $\lambda \equiv N_0\ g \ll 1$, où $N_0 = mk_F/2\pi^2\hbar^2$ est la densité d'état au niveau de l'énergie de Fermi. Le choix d'une interaction en *onde s* ne va pas de soi et l'interaction est souvent considérée comme en *onde d* dans de nombreux supraconducteurs à haute température critique. Dans l'hélium 3, l'interaction est en *onde p*.

A partir de cette forme de l'interaction, on récrit l'hamiltonien (1.1) dans l'espace réel sous la forme :

$$H = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int d\mathbf{r}\ \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2_{\mathbf{r}}}{2m} - \mu_\sigma \right) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) - g \int d\mathbf{r}\ \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r})\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r})\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \tag{1.5}$$

où $\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r})$ ($\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$) est l'opérateur champ qui crée (détruit) un fermion de spin σ en $\mathbf{r}$. On oublie dans cette expression de l'hamiltonien la coupure en énergie $\hbar\omega_c$. Son introduction dépend de l'observable calculée à partir de cet hamiltonien. Elle intervient notamment dans le calcul de la température critique BCS (voir la sous-section (1.3.2)).

Nous avons montré dans cette sous-section qu'on peut donner la forme (1.5) à l'hamiltonien décrivant les électrons d'un supraconducteur. Nous montrerons dans la sous-section 1.2.2 que l'hamiltonien a la même forme dans le cas d'un gaz dilué et ultrafroid de fermions et ce pour des raisons différentes.

1.2 Situations expérimentales

1.2.1 Effets paramagnétique et orbital dans les supraconducteurs

Conditions d'observation

La publication en 1964 des articles de Fulde-Ferrell [2] et Larkin-Ovchinnikov [3] prédisant la formation d'un état condensé inhomogène dans les supraconducteurs a depuis donné lieu à de nombreux travaux théoriques ou expérimentaux. Il existe ainsi une littérature abondante sur la caractérisation et l'observation de ces phases FFLO dans les supraconducteurs. Malgré tous ces efforts, il n'existe pas encore de preuve expérimentale incontestable de l'existence de ces phases dans des systèmes supraconducteurs. De nombreuses indications allant dans le sens de la présence d'un état FFLO ont été observées. Pourtant les expériences sont

encore trop tributaires de modèles théoriques permettant de prédire l'existence d'une phase FFLO à partir des observations expérimentales. Seule une observation directe de la modulation spatiale du paramètre d'ordre serait complètement satisfaisante si l'on peut montrer en même temps qu'il n'y a pas de circulation autour des zéros du paramètre d'ordre.

Le but de ce paragraphe n'est pas de dresser une revue exhaustive de la littérature ayant trait aux phases FFLO dans les supraconducteurs mais plutôt de donner un panorama des questions théoriques et expérimentales qui sont soulevées par l'existence de ces phases dans les supraconducteurs. Il existe notamment de nombreuses contraintes physiques qui sont des prérequis à leur existence et qui restreignent fortement les matériaux supraconducteurs susceptibles de présenter des phases FFLO.

La dynamique d'inversion des spins dans les supraconducteurs est très rapide et impose l'équilibre thermodynamique entre les deux espèces de spins. On a ainsi égalité entre les potentiels chimiques des spins $\uparrow$ et $\downarrow$. Cependant en présence d'un terme d'échange dans l'interaction de la forme

$$\gamma \int d\mathbf{r} \ \left(\hat{\psi}^{\dagger}_{\downarrow}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}) - \hat{\psi}^{\dagger}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \right), \tag{1.6}$$

celui-ci peut être absorbé dans la définition des potentiels chimiques de telle façon que $\mu_{\uparrow} = \mu + \gamma$ et $\mu_{\downarrow} = \mu - \gamma$. Dans les articles fondateurs [2, 3], le terme d'échange est censé provenir de l'interaction entre les électrons et des impuretés ferromagnétiques légèrement polarisées par un champ magnétique extérieur. Cette idée a été abandonnée depuis. Aujourd'hui, on privilégie plutôt le couplage du paramagnétisme de Pauli entre le champ magnétique extérieur H et le moment magnétique des électrons (effet Zeeman). On retrouve le terme d'échange (1.6) avec $\gamma = \mu_B H$. Les phases FFLO apparaissent alors pour des champs magnétiques de l'ordre de

$$H_P(T=0) = \frac{\Delta_0}{\sqrt{2}\mu_B}. \tag{1.7}$$

Δ_0 est le gap BCS à $T = 0$ (il est de l'ordre de l'énergie de condensation d'une paire de Cooper). $H_P(T = 0)$ est la limite paramagnétique de Clogston [11] et Chandrasekhar [12], aussi appelée limite de Pauli, à température nulle. Au-delà de ce champ magnétique critique, l'état condensé homogène BCS n'est plus énergétiquement favorisé par rapport à l'état normal. Nous reviendrons sur cet effet dans la sous-section 1.4.2.

Dans les supraconducteurs de type I, les valeurs typiques du champ magnétique critique H_c qui détruit la supraconductivité sont beaucoup plus petites que la limite de Pauli $H_P(0)$. Il faut donc se tourner vers les supraconducteurs de type II. Dans la plupart des supraconducteurs de ce type, l'effet orbital du champ magnétique provenant du terme en

$$\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} \tag{1.8}$$

dans l'hamiltonien est beaucoup plus important que l'effet paramagnétique que nous venons de voir. Le calcul du champ magnétique critique H_{c2} ne tient compte

habituellement que du terme orbital. En dessous de ce champ critique apparaît un réseau triangulaire de vortex dans la phase condensée. Cet état fut prédit en 1957 par Abrikosov [13] en utilisant la théorie de Ginzburg-Landau. D'une façon générale, il y a compétition entre les effets orbitaux et paramagnétiques, le premier privilégiant un réseau de vortex à la Abrikosov, le second une structure périodique modulée, mais sans vortex, de type FFLO.

Avant de détailler plus précisément cette compétition, mentionnons l'effet des impuretés sur les phases FFLO. Aslamazov [14], Sarma et Saint-James [15] et Takada [16] ont montré que les phases FFLO ne peuvent exister que pour un supraconducteur *propre* tel que le libre parcours moyen des électrons soit beaucoup plus grand que la longueur de cohérence

$$\ell \gg \xi_0. \tag{1.9}$$

Les impuretés agissent localement comme des potentiels qui, en diffusant les électrons, changent leur moment et brisent ainsi l'invariance par translation. Par conséquent, le moment des électrons n'est pas conservé et l'incertitude sur ce moment peut être représentée par un cercle de rayon $1/\ell$ dans l'espace des vecteurs d'onde. La formation des phases FFLO consistant à donner un moment commun $\mathbf{q}$ aux paires de Cooper, elle n'a de sens que si le rayon du cercle d'incertitude $1/\ell$ est plus petit que la norme de $\mathbf{q}$, avec $|\mathbf{q}| \sim 1/\xi_0$: on retrouve la condition (1.9).

Dans la limite inverse des supraconducteurs *sales*, le domaine d'existence des phases FFLO disparaît. En conclusion, les conditions d'existence des phases FFLO sont très restrictives : il faut un supraconducteur *propre* de type II dont l'effet orbital est faible comparé à l'effet paramagnétique. Récemment la découverte de nouveaux types de supraconducteurs, à savoir les supraconducteurs à fermions lourds, les supraconducteurs organiques bidimensionnels et les cuprates stratifiés supraconducteurs, a relancé les efforts expérimentaux ainsi que les travaux théoriques sur ces phases FFLO.

Fermions lourds

Les fermions lourds sont des matériaux où la masse effective des électrons est grande comparée aux supraconducteurs habituels ce qui donne des petites vitesses de Fermi. Le couplage orbital est ainsi fortement réduit et peut devenir comparable au couplage paramagnétique. Par ailleurs, la longueur de cohérence ξ_0 est petite si bien que la condition (1.9) est plus facilement vérifiée. L'étude théorique des supraconducteurs tridimensionnels en présence d'un champ magnétique, incluant les effets orbitaux et paramagnétiques, fut initiée en 1965 par Gruenberg et Gunther [17]. A température nulle et au voisinage de la transition, ceux-ci montrent que la structure en réseau de vortex d'Abrikosov peut coexister avec la modulation spatiale du paramètre d'ordre si cette modulation est dans la direction des lignes de vortex (direction du champ magnétique) et si l'on a :

$$\alpha = \sqrt{2}\frac{H_{c2}(T=0)}{H_P(T=0)} > 1.8\,. \tag{1.10}$$

$H_{c2}(T=0)$ est le champ magnétique critique calculé sans effet paramagnétique à $T=0$. α est donc un paramètre qui mesure le poids relatif des effets orbitaux

et paramagnétiques. Pour $\alpha < 1.8$, on retrouve uniquement le réseau de vortex d'Abrikosov sans modulation spatiale le long des lignes de vortex. Cette étude a été complétée depuis à température non nulle [18], à l'aide d'une équation de Ginzburg-Landau généralisée [19].

Les expériences sur des fermions lourds ont été réalisées sur des matériaux comme le $CeRu_2$ [20], le UPd_2Al_3 [21] le UBe_{13} [22], Ru_2Si_2 [23] ou très récemment le $CeCoIn_5$ [24]. Il n'a jamais été possible de conclure sans équivoque à l'existence d'une phase FFLO. L'interprétation des observations est compliquée par le fait qu'elle nécessite souvent une étude théorique impliquant différents effets : le couplage fort d'Eliashberg [22], l'anti-ferromagnétisme [23], etc.

Supraconducteurs quasi-bidimensionnels

Les supraconducteurs organiques et les cuprates stratifiés supraconducteurs sont de très bons candidats pour l'observation des phases FFLO. Ce sont des supraconducteurs propres fortement de type II. Leur structure cristalline est très anisotrope, formée de couches posées les unes sur les autres. En conséquence, la vitesse des électrons dans la direction perpendiculaire aux plans cristallins est très petite si bien que le couplage orbital à des champs magnétiques orientés parallèlement aux plans cristallins est négligeable. Ces matériaux se comportent donc comme des systèmes quasi-2D purement paramagnétiques. Cette réduction de la dimensionalité favorise aussi l'observation des phases FFLO puisque les effets de surface de Fermi augmentent leur domaine d'existence [25, 26].

Les premiers travaux théoriques sur ces systèmes quasi-2D ont été publiés en 1973 par Bulaevskii [27, 28]. Il y considère le cas où le champ magnétique n'est pas complètement dans le plan cristallin mais fait un angle non nul avec celui-ci, mettant ainsi en compétition les effets orbital et paramagnétique. Pour un couplage orbital pur, le paramètre d'ordre est un réseau de vortex, chaque vortex correspondant à la fonction d'onde du niveau de Landau $n = 0$ localisée en un point du réseau. Les différentes formes de réseau sont dégénérées juste au niveau du champ critique, le réseau d'Abrikosov étant favorisé à l'intérieur du domaine de la phase condensée. Une diminution de l'angle entre le champ magnétique et les plans cristallins augmente l'effet paramagnétique. On obtient ainsi une cascade de structures vers des niveaux de Landau $n \neq 0$ de plus en plus élevés. Dans la limite où l'angle s'annule, on retrouve le cas purement paramagnétique qui correspond à $n \to \infty$. Cette étude a été étendue et complétée depuis à température non nulle [29, 30]. Juste en dessous du champ critique, on peut déterminer la forme du réseau de vortex. Partant de la solution d'Abrikosov dans le régime orbital, la forme du réseau est modifiée lorsqu'on ajoute l'effet paramagnétique. Ce problème a été étudié à l'aide des équations quasiclassiques d'Eilenberger [31] ou en utilisant une équation de Ginzburg-Landau généralisée [32, 33].

Des expériences récentes sur les supraconducteurs organiques ont obtenu des résultats très encourageants qui semblent indiquer la présence d'une phase FFLO [34, 35].

Remarques complémentaires

Selon les situations expérimentales, d'autres effets peuvent modifier la physique des phases FFLO. Nous n'en donnons ici qu'un aperçu. Tout d'abord, la plupart des études théoriques supposent un appariement en *onde s* et c'est notamment le cadre de la première partie de cette thèse. Pour les supraconducteurs organiques quasi-2D, l'interaction est probablement en *onde d* ce qui change totalement la structure des phases FFLO [30, 36]. Les effets de liquides de Fermi ont pour l'instant été peu étudiés, ils changent pourtant notablement les diagrammes de phase [37]. Le domaine d'existence des phases FFLO peut être augmenté, notamment en présence d'anti-ferromagnétisme [23] ou si l'appariement de Cooper mélange les états triplets et singulet [38]. Récemment et dans le contexte des atomes froids, Combescot [39] a fait remarquer que l'anisotropie de l'interaction effective peut fortement augmenter le domaine d'existence des phases FFLO.

Notre dernière remarque concerne le couplage spin-orbite correspondant à la diffusion des électrons par des impuretés magnétiques. Ce couplage tend à augmenter la susceptibilité magnétique de l'état condensé ce qui a pour effet de repousser le champ magnétique critique au-delà de la limite paramagnétique de Pauli. On peut ainsi confondre expérimentalement cet effet avec une signature de la présence d'une phase FFLO. Qui plus est, une forte interaction spin-orbite est très défavorable à l'existence de phases FFLO.

1.2.2 Gaz d'atomes fermioniques à très basse température

Expériences actuelles

Les très récents succès expérimentaux dans le domaine des gaz froids, à l'instar de la condensation de Bose-Einstein observée pour la première fois en 1995 dans un système gazeux dilué [40, 41], rendent optimiste sur la possibilité d'observer une transition vers un état condensé de type BCS dans un gaz d'atomes ultrafroids. Depuis maintenant plusieurs années, de nombreux phénomènes de physique de la matière condensée ont été reproduits dans ces vapeurs alcalines conformément aux prédictions théoriques (voir par exemple [42]). Le mécanisme de formation d'un condensat BCS pour un gaz ultrafroid est semblable à celui des supraconducteurs [43] ou de l'hélium 3 superfluide. Les atomes qui sont dans des états hyperfins différents forment des paires de Cooper en présence d'une interaction attractive, la condensation de ces paires de Cooper conduisant à un état superfluide non chargé. Les niveaux hyperfins jouent en fait le rôle des spins pour les supraconducteurs [44].

Les conditions expérimentales et théoriques de ces systèmes sont très avantageuses. Avançons quelques raisons :

- La physique de la collision entre deux atomes est très bien comprise et les caractéristiques du potentiel d'interaction font l'objet d'un bon accord entre la théorie et les données expérimentales. Ce sont de bonnes conditions pour développer une théorie microscopique.
- Les potentiels d'interaction sont à courte portée et les gaz sont dilués ce qui permet de remplacer ces potentiels par des interactions de contact effectives.

- Les systèmes sont très propres, il n'y a pas ou peu d'impuretés, les diverses interactions sont connues et les interactions avec le milieu extérieur sont négligeables.
- Les méthodes de mesure et de manipulation expérimentales sont multiples et souvent précises. En utilisant des lasers dont l'interaction avec un gaz peu dense est très bien connue, on peut induire des transitions entre différents niveaux atomiques, jouer sur les différents degrés de liberté des atomes, ou encore mesurer la fluorescence pour détecter les atomes, etc. De même, l'adjonction de champs magnétiques modifie l'état interne des atomes d'une façon que l'on comprend bien.

En conclusion, on a des systèmes modèles facilement contrôlables avec potentiellement peu d'intermédiaires pour l'interprétation des données expérimentales.

De nombreux groupes expérimentaux travaillent actuellement sur des gaz de fermions de ^{6}Li ou de ^{40}K en vue d'observer la transition BCS [45, 46, 47, 48, 49]. On atteint aujourd'hui des températures sensiblement plus petites que la température de Fermi mais il semble difficile de descendre largement en dessous à cause du blocage de Pauli. Le principe de Pauli réduit fortement l'espace des phases accessible pour les collisions, excluant à très basse température l'intérieur de la surface de Fermi. Par conséquent, le taux de collision chute ce qui stoppe les processus d'évaporation. Les efforts actuels [50, 51] sont plutôt axés sur l'augmentation de l'interaction attractive de façon à rapprocher la température critique de transition de la température de Fermi.

Lien avec la théorie BCS

Quelle est la forme de l'hamiltonien qui va décrire ces gaz d'atomes froids ? On considère le cas d'un gaz de fermions ultrafroids piégés et on se restreint au cas où les atomes peuvent se trouver uniquement dans deux niveaux hyperfins différents. L'hamiltonien du système est alors :

$$H = H_0 + H_I \tag{1.11}$$

avec

$$H_0 = \sum_\sigma \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2_\mathbf{r}}{2m} + U(\mathbf{r}) - \mu_\sigma \right) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \tag{1.12}$$

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}') V_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \tag{1.13}$$

$U(\mathbf{r})$ est le potentiel extérieur dû au piège, $V_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ est le potentiel d'interaction (courte portée) entre atomes. σ désigne le niveau hyperfin de l'atome, c'est l'équivalent du spin des électrons. Pour faire le lien avec les électrons dans les supraconducteurs, on note $\uparrow$ et $\downarrow$ les deux niveaux hyperfins.

Dans le régime des très basses températures, on va remplacer cet hamiltonien par un hamiltonien effectif qui possède le même spectre et les mêmes états propres à basse énergie [52]. En effet, le vrai potentiel d'interaction $V_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ a une forme générale compliquée. De plus, il ne peut pas être utilisé directement dans

une théorie perturbative car il prend des valeurs non négligeables à courte distance. Néanmoins, seules les propriétés de collision à basse énergie de deux atomes interagissant dans le vide selon le potentiel $V_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ interviennent dans le calcul des propriétés de basse énergie du gaz. En particulier, cette collision est majoritairement en *onde s* -ce qui exclut les collisions entre atomes de même spin (voir la sous-section (1.1.2))- et elle est caractérisée uniquement par la longueur de diffusion a. On remplace donc dans l'hamiltonien $V_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ par un potentiel proche d'un potentiel de contact modèle $V = (4\pi\hbar^2 a/m)\delta_{\sigma,-\sigma}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, les deux potentiels ayant les mêmes caractéristiques de collision en *onde s*.

Selon le signe de la longueur de diffusion a, l'interaction effective entre atomes peut être répulsive ($a > 0$) ou attractive ($a < 0$). On se restreint ici au cas où la longueur de diffusion est négative car le cas d'une interaction attractive est la situation standard conduisant à une condensation BCS. En conclusion, l'hamiltonien prend la forme (1.5) de la théorie BCS si l'on pose :

$$g = \frac{4\pi|a|\hbar^2}{m} \tag{1.14}$$

La pertinence du modèle BCS étudié dans cette thèse va donc au-delà de la description des supraconducteurs puisqu'il peut aussi s'appliquer à la description des gaz d'atomes froids fermioniques. Précisons cependant quelques restrictions de cette application :

- On a étudié un système homogène sans potentiel extérieur. Dans les phases FFLO étudiées, le paramètre d'ordre varie sur une échelle de longueur de l'ordre de la longueur de cohérence, notée communément ξ_0. Si cette longueur est plus petite que la taille du piège harmonique, on peut s'attendre à ce que les phases FFLO ne soient pas trop modifiées par la présence du piège. Il est toutefois possible que le piège privilégie certaines formes du paramètre d'ordre plutôt que d'autres.
- Nous sommes dans le cadre d'interactions faibles ($\lambda = N_0\, g \ll 1$ avec $\lambda = 2k_F|a|/\pi$) ce qui conduit à la prédiction de faibles températures critiques de transition, vraisemblablement trop petites pour être observées expérimentalement. On peut augmenter les interactions entre atomes en se plaçant à proximité d'une résonance de Feshbach [53, 54]. Certains auteurs suggèrent que la température critique de transition pourrait alors devenir de l'ordre de la température de Fermi [55], température qui a déjà été atteinte de nombreuses expériences. On entre néanmoins dans un régime d'interactions fortes dont la compréhension théorique est plus délicate et surtout loin d'être achevée.

1.3 Instabilité BCS dans la phase normale

1.3.1 Pôle de la fonction de corrélation de paires

Nous allons détailler maintenant plus précisément l'instabilité de Cooper. Nous nous plaçons dans l'état normal dans le cas homogène (sans potentiel extérieur). En présence d'une interaction attractive, aussi faible soit-elle, nous allons montrer

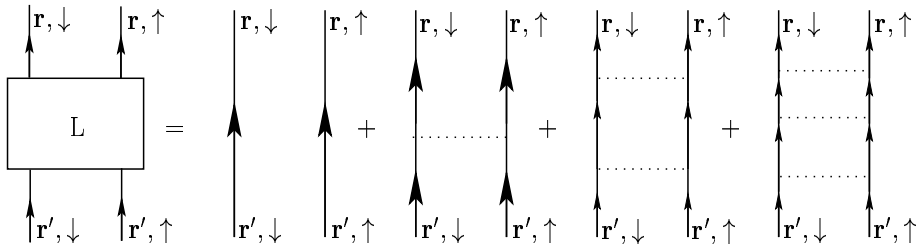


FIG. 1.1: *Diagrammes échelles* dans le développement diagrammatique de L.

que l'état normal est instable en dessous d'une température critique [56]. Pour cela, nous considérons le propagateur de paires (voir **encadré 1**) :

$$L(\mathbf{r},\tau;\mathbf{r}',\tau') = -\langle T_\tau[\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}',\tau')\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}',\tau')]\rangle \tag{1.15}$$

qui, du fait des invariances spatiale et temporelle, est une fonction de $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ et $\tau-\tau'$. L'approximation que l'on utilise est la suivante : dans le développement diagrammatique de L, on ne garde que les *diagrammes échelles*, présentés figure 1.1. La resommation de ces diagrammes conduit à :

$$L(\mathbf{r},\tau) = G^0_\uparrow(\mathbf{r},\tau)G^0_\downarrow(\mathbf{r},\tau) + g\int_0^\beta d\tau_1 \int d\mathbf{r}_1 L(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1,\tau-\tau_1)G^0_\uparrow(\mathbf{r}_1,\tau_1)G^0_\downarrow(\mathbf{r}_1,\tau_1), \tag{1.16}$$

ce qui donne, dans l'espace de Fourier :

$$\begin{aligned} L(\mathbf{q},\tilde{\omega}_n)\left[1-\frac{g}{\beta}\sum_l\int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}G^0_\downarrow(\mathbf{k},\omega_l)G^0_\uparrow(\mathbf{q}-\mathbf{k},\tilde{\omega}_n-\omega_l)\right] \\ = \frac{1}{\beta}\sum_l\int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}G^0_\downarrow(\mathbf{k},\omega_l)G^0_\uparrow(\mathbf{q}-\mathbf{k},\tilde{\omega}_n-\omega_l) \end{aligned} \tag{1.17}$$

avec $\omega_l = \pi(2l+1)T$ (fermions) et $\tilde{\omega}_n = 2\pi nT$ (bosons). Les pôles de $L(\mathbf{q},i\tilde{\omega}_n)$ sont donnés par l'annulation du terme entre crochets dans l'équation (1.17). On détermine ici la continuation analytique de $L(\mathbf{q},\tilde{\omega}_n)$ dans le demi-plan complexe supérieur en remplaçant $i\tilde{\omega}_n$ ($\tilde{\omega}_n > 0$) par z complexe. L'expression de $G^0_\sigma(\mathbf{q},\omega_l)$ étant connue (voir **encadré 1**), on peut déterminer plus précisément les pôles de $L(\mathbf{q},z)$. Pour cela, on remarque que dans les termes entre crochets de l'équation (1.17), on a une somme de la forme $T\sum_{i\omega_l} f(i\omega_l)$, $f(z)$ ayant des pôles simples en $z = \xi_{\mathbf{k}} + \bar{\mu}$ et $z = \xi_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} - \bar{\mu}$.

En remplaçant la somme sur les fréquences de Matsubara ω_l par une intégrale dans le plan complexe de la fonction $f(z)\tanh(\beta z/2)$ et en déformant convenablement [57] le contour d'intégration, on montre que l'on obtient la formule suivante :

$$\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_l} f(i\omega_l) = \sum_n r_n \tanh\left(\frac{\beta z_n}{2}\right) \tag{1.18}$$

où les z_n sont les pôles simples de $f(z)$ et r_n les résidus correspondant.

Encadré 1 : propagateur de paires et instabilité

On introduit le propagateur de paires :

$$L(\mathbf{r},\tau;\mathbf{r}',\tau') = -\langle T_\tau[\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}',\tau')\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}',\tau')]\rangle \quad \text{(B1-1)}$$

où T_τ désigne le *produit ordonné en temps* défini par :

$$T_\tau[c(\mathbf{r},\tau)c^\dagger(\mathbf{r}',\tau')] = \theta(\tau-\tau')c(\mathbf{r},\tau)c^\dagger(\mathbf{r}',\tau') + \theta(\tau'-\tau)c^\dagger(\mathbf{r}',\tau')c(\mathbf{r},\tau) \quad \text{(B1-2)}$$

avec $c(\mathbf{r},\tau) = \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r},\tau)$ et $c^\dagger(\mathbf{r},\tau) = \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}',\tau')\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}',\tau')$.
$\langle\cdots\rangle = Tr[\cdots e^{-\beta H}]/Tr[e^{-\beta H}]$ désigne la moyenne statistique dans l'ensemble grand canonique avec l'hamiltonien H, Eq. (1.5), à la température $T = 1/\beta$.
Les opérateurs champs sont propagés pendant un temps imaginaire τ selon :

$$\hat{\psi}(\mathbf{r},\tau) = e^{H\tau}\hat{\psi}(\mathbf{r})e^{-H\tau}, \quad \text{(B1-3)}$$
$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},\tau) = e^{H\tau}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})e^{-H\tau}, \quad \text{(B1-4)}$$

de sorte qu'ils ne sont plus hermitiques conjugués l'un de l'autre.
L'interaction entre fermions conduit, dans un développement perturbatif, à développer le propagateur de paires selon une série infinie de termes décrivant des processus d'interactions multiples entre fermions. On peut représenter ces termes à l'aide de graphes de Feynman. Le calcul correspondant est néanmoins impossible à réaliser en général, il faut faire une approximation en ne retenant que certains graphes. A l'ordre le plus bas, on obtient par exemple : $L(\mathbf{r}-\mathbf{r}',\tau-\tau') = G^0_\uparrow(\mathbf{r}-\mathbf{r}',\tau-\tau')G^0_\downarrow(\mathbf{r}-\mathbf{r}',\tau-\tau')$. Les fonctions de Green $G^0_\sigma(\mathbf{r}-\mathbf{r}',\tau-\tau')$, correspondant à la propagation libre d'un fermion de spin σ, sont périodiques en $\tau-\tau'$, de période β, et se développent par conséquent suivant les fréquences de Matsubara $\omega_n = \pi(2n+1)T$ $(n \in Z)$:

$$G^0_\sigma(\mathbf{r},\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} G^0_\sigma(\mathbf{k},\omega_n)e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_n\tau)} \quad \text{(B1-5)}$$

avec $G^0_\sigma(\mathbf{k},\omega_n) = (i\omega_n - \epsilon_k + \mu_\sigma)^{-1}$ et $\epsilon_k = \hbar^2k^2/2m$. La transformée $L(\mathbf{q},\omega_n)$ de $L(\mathbf{r},\tau)$ est quant à elle définie pour $\omega_n = 2\pi nT$ $(n \in Z)$ étant donné le caractère bosonique de $c(\mathbf{r},\tau)$.
Le prolongement analytique de $L(\mathbf{q}, i\omega_n \to z)$ permet de faire le lien avec la fonction de corrélation :

$$L_R(\mathbf{r},t) = -\langle[c(\mathbf{r},t),c^\dagger(\mathbf{0},0)]\rangle\theta(t), \quad \text{(B1-6)}$$

où $c(\mathbf{r},t) = e^{iHt}c(\mathbf{r})e^{-iHt}$ $(c^\dagger(\mathbf{r}) = (c(\mathbf{r}))^\dagger)$. Ainsi, on a :

$$L_R(\mathbf{r},t) = \int_{\mathcal{C}} dz L(\mathbf{r},z)e^{-izt}, \quad \text{(B1-7)}$$

le contour $\mathcal{C}$ étant juste au-dessus de l'axe réel. D'après sa définition (B1-6), $L(\mathbf{r},z)$ ne possède pas de pôle dans le demi-plan complexe supérieur. Dans le cas contraire, cela correspondrait pour $L_R(\mathbf{r},t)$ à un terme qui croît exponentiellement avec le temps indiquant la présence d'une instabilité dans le système.

Les singularités de $L(\mathbf{k}, z)$ sont ainsi déterminées par les solutions de :

$$\frac{1}{g} = -\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{\tanh((\xi_{\mathbf{k}} + \bar{\mu})/2) + \tanh((\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \bar{\mu})/2)}{2z - \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \tag{1.19}$$

où l'on a posé $\mu_\uparrow = \mu + \bar{\mu}$, $\mu_\downarrow = \mu - \bar{\mu}$ et $\xi_k = \epsilon_k - \mu$. On voit d'abord dans cette équation la présence d'une ligne de coupure pour z appartenant à l'axe réel Ces singularités correspondent aux excitations de paires du système. Par ailleurs, en dessous d'une température critique, une nouvelle solution imaginaire pure de la forme $z = i\omega_0$, apparaît au voisinage de $z = 0$. Elle est due à la présence dans le spectre d'un état lié correspondant à l'appariement de deux fermions. On rejoint ainsi l'argument de Cooper sur l'instabilité du système par rapport à la formation d'une paire de Cooper. Ce pôle dans le demi-plan supérieur souligne une incohérence dans la théorie due au fait que l'état normal n'est plus l'état de plus basse énergie. Autrement dit, l'état normal développe une instabilité et le système évolue alors vers l'état condensé BCS.

Le critère donnant la position de la transition correspond à l'apparition des solutions instables. Il faut donc résoudre l'équation (1.19) dans la limite $z \to 0$. Il faut en outre déterminer la valeur la plus favorable du vecteur $\mathbf{q}$. Celui-ci est le vecteur d'onde total de la paire de fermions. Pour $\bar{\mu} = 0$, on montre facilement que le vecteur optimal est $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, ce qui correspond à former des paires au repos. On comprend mieux ce résultat si l'on pense en terme de condensation de Bose-Einstein des paires de Cooper. Les bosons condensent dans l'état fondamental qui est pour un système homogène l'état d'impulsion nulle. Ce type de condensation ne brise par ailleurs pas l'invariance par translation.

Nous allons voir cependant que pour $\bar{\mu}$ supérieur à une certaine valeur critique $\bar{\mu}_c$, l'instabilité a lieu pour $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ de sorte que l'invariance par translation est brisée. Les paires de Cooper ainsi formées ont une impulsion non nulle sans qu'aucune direction ne soit privilégiée. Nous verrons dans la suite que cette instabilité conduit à un état condensé dont le paramètre d'ordre est modulé suivant $\mathbf{q}$, de la forme $\Delta \propto e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$. Cette instabilité est le signe de l'apparition des phases inhomogènes FFLO.

1.3.2 Etude de l'équation donnant l'instabilité

Finalement, l'équation donnant la ligne de stabilité de l'état normal dans le plan $(\bar{\mu}, T)$ est donnée par :

$$\frac{1}{\beta}\sum_l \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} G^0_\downarrow(\mathbf{k}, \omega_l) G^0_\uparrow(\mathbf{q} - \mathbf{k}, -\omega_l) = \frac{1}{g} \tag{1.20}$$

où $\mathbf{q}$ est choisi de manière à maximiser la température. Prise telle quelle, cette expression est divergente à grand vecteur d'onde. Dans la théorie BCS des supraconducteurs, les contributions des excitations de haute énergie sont supprimées par la coupure en $\hbar\omega_c$. On rétablit donc cette coupure dans (1.20) et on n'a pas de divergence. Toutefois, le résultat du calcul de la température critique BCS dépend fortement de la coupure.

Dans le cas des gaz froids, cette divergence est due à la simplification que nous avons apportée en remplaçant le vrai potentiel par le potentiel modèle de contact dans la sous-section 1.2.2. Ainsi, on décrit bien les excitations telles que $|\mathbf{k}| < 1/r_{\rm at}$ mais pas les modes de plus haute énergie [1]. Or ce sont précisément ces modes de haute énergie qui donnent dans l'expression (1.20) une contribution divergente. Cet inconvénient, qui est uniquement dû au choix du potentiel modèle, n'est d'aucune gravité d'un point de vue théorique. Il apparaît aussi dans le problème de la collision de deux atomes, problème qu'on sait par ailleurs exactement résoudre lorsqu'on garde le vrai potentiel. Il faut donc, si l'on veut calculer la température critique BCS, décrire plus précisément les modes de haute énergie ($|\mathbf{k}| \gtrsim 1/r_{\rm at}$). Ce ne sera cependant pas nécessaire dans notre cas.

Température critique BCS pour un supraconducteur

On a vu dans la sous-section 1.1.2 que l'interaction locale entre les électrons due au couplage avec le réseau cristallin s'accompagne d'une fréquence de coupure ω_c de l'ordre de la fréquence de Debye. Au-delà de cette fréquence, la réaction du réseau au passage d'un électron n'est plus instantanée et l'effet de retard de l'interaction entre électrons doit être pris en compte. Pour ces hautes fréquences l'interaction effective entre électrons devient répulsive. On néglige cette contribution qui n'intervient pas dans le mécanisme BCS en appliquant brutalement une coupure en ω_c. Dans les supraconducteurs en interaction faible, on a la hiérarchie suivante :

$$T_c^0 \ll \hbar\omega_c \ll T_F. \tag{1.21}$$

Aux températures voisines ou plus petites que T_c^0, seuls les phonons de basse énergie sont excités si bien que l'approximation BCS d'instantanéité de l'interaction entre les électrons est justifiée.

Les modes intervenant dans la formation de l'état BCS sont dans une couche d'épaisseur $2\hbar\omega_c$ autour de la surface de Fermi. On va donc développer pour ce calcul et pour la suite, les différents termes intervenant dans l'expression (1.20) au voisinage de la surface de Fermi. Par exemple, l'élément d'intégration est approximé par :

$$\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} = d\tilde{\Omega} N_0 d\xi \tag{1.22}$$

où N_0 est la densité d'état pour un spin au niveau de la surface de Fermi, $\xi = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m - \mu$ est l'énergie d'une particule libre par rapport à la surface de Fermi. $d\tilde{\Omega}$ désigne l'angle solide élémentaire, à $D-1$ dimensions, sur la sphère de Fermi et dans la direction du vecteur $\mathbf{k}$, normalisé par :

$$\int_{S_F} d\tilde{\Omega} = 1. \tag{1.23}$$

En particulier, $d\tilde{\Omega} = d\theta/2\pi$ à deux dimensions et $d\tilde{\Omega} = \sin\theta d\theta d\phi/4\pi$ à trois dimensions.

[1] $r_{\rm at}$ est une longueur atomique typique comme la distance moyenne entre le noyau et les électrons.

On linéarise l'expression $\xi_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} \simeq \xi_{\mathbf{q}} - \hbar v_F \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{q}$ où $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ est un vecteur unitaire de même direction que $\mathbf{k}$. La validité de cette approximation tient à l'existence de deux échelles de longueur bien distinctes. $2\pi/k_F$, qui donne la distance moyenne entre fermions, est beaucoup plus petite que la longueur de cohérence ξ_0, définie par :

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{\pi \Delta_0}, \tag{1.24}$$

où le gap à température nulle Δ_0 est égal à :

$$\Delta_0 = \frac{\pi}{e^C} T_c^0, \tag{1.25}$$

avec $C = 0.57721...$ la constante d'Euler. Cette comparaison des deux longueurs découle en fait de l'inégalité $T_c^0 \ll T_F$. Nous allons voir que la période caractéristique de l'instabilité FFLO $2\pi/|\mathbf{q}|$ est comparable à ξ_0. Pour la suite, on posera $\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/|\mathbf{q}|$ et on définit :

$$\bar{q} = \frac{\hbar v_F |\mathbf{q}|}{2\bar{\mu}}. \tag{1.26}$$

Pour $\bar{q}$ de l'ordre de 1, $|\mathbf{q}| \simeq 1/\xi_0$ sachant que l'on trouve que $\bar{\mu}$ et Δ_0 sont du même ordre.

Finalement l'équation (1.20) se récrit :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{l}^{|\omega_l| \leq \omega_c} \int_{S_F} d\tilde{\Omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{(i\omega_l - \xi - \bar{\mu})(-i\omega_l - \xi + \bar{\mu} + 2\bar{\mu}\,\bar{q}\,\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}})} = \frac{1}{\lambda} \tag{1.27}$$

où $\lambda = gN_0$. L'intégration sur $d\tilde{\Omega}$ est en fait une intégration sur la direction de $\hat{\mathbf{k}}$. L'intégration sur ξ se fait aisément en fermant le contour dans le plan complexe. On trouve :

$$T \sum_{l}^{|\omega_l| \leq \omega_c} \int_{S_F} d\tilde{\Omega} \frac{\pi\, \mathrm{sgn}(\omega_l)}{\omega_l - i\bar{\mu}(1 + \bar{q}\,\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}})} = \frac{1}{\lambda}. \tag{1.28}$$

Pour $\bar{q} = 0$, on peut effectuer la sommation sur les fréquences. On obtient pour la température critique pour $\bar{\mu} = 0$:

$$T_c^0 = \frac{2e^C}{\pi}\, \hbar\omega_c\, e^{-1/\lambda}. \tag{1.29}$$

Ce résultat est le même que celui obtenu par Bardeen, Cooper et Schrieffer [1]. Dans notre cas, on vient de la phase normale contrairement au traitement BCS où le calcul est effectué dans la phase condensée.

Température critique pour un gaz froid

On peut aussi calculer la température critique BCS dans le cadre de cette sommation des diagrammes échelles [43] si l'on décrit convenablement les modes de haute énergie. Plusieurs méthodes conduisent au résultat : on peut remplacer le potentiel local par le pseudo-potentiel régularisé de Fermi [52, 58]. On peut aussi, comme on le fait dans la seconde partie de cette thèse, discrétiser l'espace

réel puis faire tendre la taille du réseau vers zéro. La dernière méthode est diagrammatique [59] : elle consiste à se ramener au problème de la collision de deux particules que l'on sait résoudre de façon à obtenir une expression pour laquelle la contribution des modes de haute énergie n'est pas divergente. On obtient la température critique suivante pour $\bar{\mu} = 0$ dans la limite $\lambda \ll 1$:

$$T_c^0 = \frac{8e^{C-2}}{\pi} T_F \, e^{-1/\lambda} \tag{1.30}$$

où $\lambda = 2k_F|a|/\pi$. Il se trouve, comme on le verra plus loin, que cette expression prédit la forme du comportement asymptotique de la température critique lorsque $\lambda \to 0$ mais avec le mauvais coefficient multiplicateur. Le bon coefficient multiplicateur est obtenu lorsqu'on inclut des diagrammes supplémentaires dans la sommation.

Cependant, la détermination exacte de la température critique de transition T_c^0 n'est pas nécessaire. En effet, si l'on soustrait à l'équation (1.20) pour $\bar{\mu} \neq 0$, cette même équation pour $\bar{\mu} = 0$, on constate que la contribution des modes de haute énergie n'est plus divergente et devient même négligeable. Le modèle de potentiel local est donc suffisant dans ce cas. On trouve que les modes qui interviennent de façon prépondérante dans le calcul ont une énergie de l'ordre de la température de transition T_c^0 qui est beaucoup plus petite que E_F et donc *a fortiori* de $\hbar^2/mr_{\text{at}}^2$, l'énergie d'un mode de vecteur d'onde $1/r_{\text{at}}$. Ainsi, on peut faire un développement au voisinage de la surface de Fermi puis intégrer sur la variable ξ comme dans le calcul de la température critique d'un supraconducteur. On obtient finalement l'équation :

$$\ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) = 2\pi T \sum_{n=0}^{+\infty} \int_{S_F} d\tilde{\Omega} \mathrm{Re}\left[\frac{1}{\omega_n - i\bar{\mu}(1 + \bar{q}\ \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}})} - \frac{1}{\omega_n}\right] \tag{1.31}$$

où l'on a utilisé le fait que

$$T_c^0 \sum_{n \geq 0}^{n \leq \hbar\omega_c/2\pi T_c^0} \frac{1}{\pi T_c^0 (2n+1)} - T \sum_{n \geq 0}^{n \leq \hbar\omega_c/2\pi T} \frac{1}{\pi T (2n+1)} = \ln\left(\frac{T_c^0}{T}\right) \tag{1.32}$$

$\bar{q}$ est choisi de façon à maximiser la température T. L'expression (1.31) s'applique aussi bien à un supraconducteur qu'à un gaz froid d'atomes fermioniques. Les informations sur les modes de haute énergie, qui sont différents dans les deux systèmes physiques, sont en fait présentes dans le calcul de la température critique T_c^0 mais n'apparaissent pas explicitement dans cette expression.

Diagrammes d'ordre supérieur

La sommation des diagrammes échelles se justifie bien lorsque l'interaction entre fermions est faible ($\lambda \ll 1$). C'est l'approximation la plus simple qui permet d'obtenir l'effet d'instabilité de l'état normal par rapport à la formation de paires de Cooper. Cette méthode de resommation est en fait équivalente à l'approche BCS habituelle et l'on retrouve en venant de la phase normale la température critique BCS.

Dans la construction du développement diagrammatique de sommation des échelles, le processus d'interaction élémentaire est représenté figure 1.2, il correspond à la collision entre un fermion de spin $\uparrow$ et de vecteur d'onde $\mathbf{k}$, et un fermion de spin $\downarrow$ et de vecteur d'onde $\mathbf{q}-\mathbf{k}$. Cette interaction élémentaire entre fermions

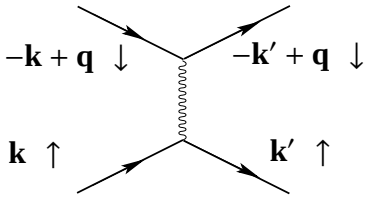


FIG. 1.2: Processus d'interaction élémentaire entre deux fermions.

peut être complétée dans notre développement diagrammatique par le mécanisme irréductible d'ordre supérieur dans l'interaction représenté figure 1.3.

Ainsi on corrige l'interaction directe $-g$ entre fermions par une interaction indirecte d'ordre deux dans l'interaction [60]. Dans le cas des supraconducteurs, on

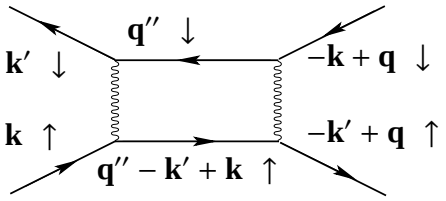


FIG. 1.3: Interaction indirecte entre deux fermions due aux interactions avec les autres fermions. Diagramme d'ordre 2 dans l'interaction.

montre [2] que l'inclusion de ce diagramme supplémentaire dans la sommation des échelles donne une contribution négligeable à la température critique de transition dans la limite d'une faible interaction ($\lambda \ll 1$). Le cas des gaz froids fermioniques est différent puisqu'il n'y a pas d'énergie de coupure dans l'interaction. On montre [62] que ce diagramme est nécessaire pour déterminer le comportement asymptotique de la température de transition BCS lorsque $\lambda \to 0$. Le calcul complet donne [63] :

$$T_c^0 = \left(\frac{2}{e}\right)^{7/3} \frac{e^C}{\pi}\, T_F\, e^{-1/\lambda} \tag{1.33}$$

c'est-à-dire la même forme que (1.30) mais avec le bon coefficient multiplicateur.

Cependant, si l'on soustrait dans les équations obtenues le cas $\bar{\mu} \neq 0$ du cas $\bar{\mu} = 0$, la correction apportée par le diagramme 1.3 devient négligeable aussi bien dans le cas des supraconducteurs que dans le cas des gaz froids fermioniques et on se ramène finalement à l'équation (1.31). Il semble donc que la soustraction entre les cas $\bar{\mu} \neq 0$ et $\bar{\mu} = 0$ permette d'inclure les contributions de nombreux

[2] voir page 286 de [61].

diagrammes d'ordres supérieurs et le domaine de validité de l'équation (1.31) est vraisemblablement plus étendu que le domaine de validité des températures critiques (1.29) et (1.33).

Plus généralement, les vecteurs d'onde typiques intervenant dans l'équation (1.31) sont au voisinage de la surface de Fermi, dans une couche d'épaisseur T_c^0 environ. Ce n'est pas le cas du calcul de la température critique BCS (1.33) d'un gaz froid dans lequel l'échelle typique d'énergie est l'énergie de Fermi. Par conséquent, pour un gaz froid fermionique en interaction forte, le calcul de la température critique est un problème très difficile car il faut aller au-delà de la description de Landau des liquides de Fermi. Par contre, si l'on s'intéresse à la température critique relative T/T_c^0 en soustrayant comme on l'a fait, les cas $\bar{\mu} \neq 0$ et $\bar{\mu} = 0$, la description de Landau restera correcte tant que $T_c^0 \ll T_F$. Pour autant, l'équation (1.31) n'en sera pas forcément correcte dans ce régime d'interactions fortes. L'anisotropie de l'interaction effective entre fermions peut fortement changer le comportement de la ligne de transition FFLO [39].

1.3.3 Diagramme dans le plan $(\bar{\mu}, T)$

On représente figure 1.4 les lignes d'instabilité de l'état normal à 2D et 3D dans le plan $(\bar{\mu}, T)$. La norme du vecteur d'onde $\bar{q}$ des paires de Cooper correspondant à cette instabilité est présentée figure 1.5. Ces lignes sont calculées numériquement à partir de l'équation (1.31). L'intégration angulaire donne, à 2D :

$$\ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) = 2\pi T \sum_{n=0}^{+\infty} \mathrm{Re}\left[\frac{1}{\sqrt{(\omega_n - i\bar{\mu})^2 + (\bar{q}\bar{\mu})^2}} - \frac{1}{\omega_n}\right] \tag{1.34}$$

et à 3D :

$$\ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) = 2\pi T \sum_{n=0}^{+\infty} \mathrm{Re}\left[\frac{1}{2i\bar{\mu}\bar{q}} \ln\left(\frac{\omega_n - i\bar{\mu}(1-\bar{q})}{\omega_n - i\bar{\mu}(1+\bar{q})}\right) - \frac{1}{\omega_n}\right]. \tag{1.35}$$

L'effet FFLO ($\bar{q} \neq 0$) apparaît continûment au-delà du point tricritique noté ($\bar{\mu}_c$,T_c). Au voisinage de ce point tricritique et pour des températures inférieures ($T < T_c$), l'état normal est déstabilisé par des fluctuations du paramètre d'ordre de grande longueur d'onde. Si l'on diminue la température, la longueur d'onde de l'instabilité FFLO diminue rapidement jusqu'à des valeurs de l'ordre de la longueur de cohérence ξ_0 du système.

La position du point tricritique se détermine de façon précise en développant en $\bar{q}$ le terme de droite dans l'équation (1.31). L'ordre zéro en $\bar{q}$ ne dépend pas de la dimension si bien que les lignes d'instabilité à 2D et 3D sont confondues jusqu'au point tricritique. Le premier ordre en $\bar{q}$ est nul comme tous les termes d'ordre impair et le développement à l'ordre 2 s'écrit

$$\ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) = 2\pi T \sum_{n=0}^{+\infty} \mathrm{Re}\left[\frac{1}{\omega_n - i\bar{\mu}} - \frac{1}{\omega_n}\right] + \bar{q}^2 \left[\int_{S_F} d\tilde{\Omega} \left(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}}\right)^2\right] a_2(\bar{\mu}/T) + \cdots \tag{1.36}$$

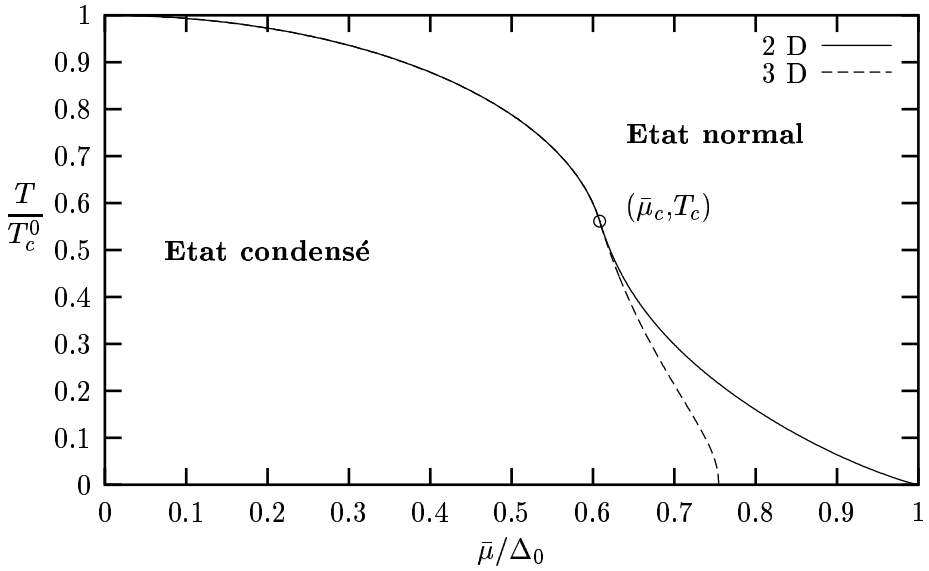


FIG. 1.4: Ligne d'instabilité de l'état normal due à la formation de paires de Cooper à 2D (ligne pleine) et 3D (tirets). On rappelle que $\bar{\mu}$ est la demi-différence de potentiel chimique entre les deux populations de spins. A température nulle, on obtient $\bar{\mu}/\Delta_0 = 0.754$ à 3D et $\bar{\mu}/\Delta_0 = 1$ à 2D.

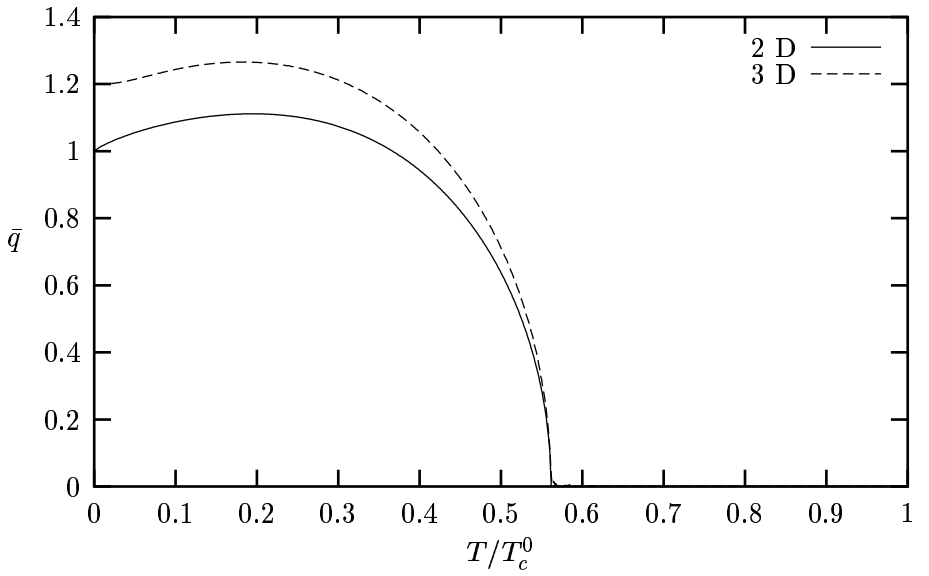


FIG. 1.5: Vecteur d'onde du centre de masse des paires de Cooper correspondant à l'instabilité de la figure 1.4. $\bar{q}$ est en unité réduite, voir (1.26). A température nulle, $\bar{q} = 1$ à 2D et $\bar{q} = 1.1997$ à 3D.

avec

$$a_2(\bar{\mu}/T) = -2\bar{\mu}^2 \pi T \mathrm{Re} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{(\omega_n - i\bar{\mu})^3}. \tag{1.37}$$

L'intégration angulaire apparaissant entre crochets dans l'équation (1.36) dépend

de la dimension d'espace mais pas le signe global du terme d'ordre 2 en $\bar{q}$. Par conséquent, le changement de signe de $a_2(\bar{\mu}/T)$ correspond à l'apparition des phases FFLO lorsqu'on descend en température et ce indépendamment de la dimension d'espace. $a_2(\bar{\mu}/T)$ est négatif pour $T > T_c$, positif pour $T < T_c$. La position du point tricritique est finalement donnée par $a_2(\bar{\mu}_c/T_c) = 0$ et $a_0(\bar{\mu}_c, T_c) = 0$ où l'on a posé

$$a_0(\bar{\mu}, T) = \ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) + 2\pi T \,\mathrm{Re}\sum_{n=0}^{+\infty}\left(\frac{1}{\omega_n} - \frac{1}{\omega_n - i\bar{\mu}}\right). \tag{1.38}$$

On trouve $\bar{\mu}_c = 0.608\Delta_0$ et $T_c = 0.561T_c^0$.

1.4 Discussion physique des phases FFLO

1.4.1 Couplage des surfaces de Fermi

On peut donner une image physique qui précise les raisons de l'apparition de la brisure de symétrie FFLO. Les vecteurs d'onde principalement impliqués dans la formation des paires de Cooper sont situés à proximité de la surface de Fermi sur une bande dont la largeur en énergie est de l'ordre de T_c^0. Pour des potentiels chimiques différents, les surfaces de Fermi des deux états de spins n'ont pas le même rayon. L'appariement BCS habituel entre les états ($\mathbf{k}$,$\uparrow$) et ($-\mathbf{k}$,$\downarrow$) suppose donc que la distance entre les surfaces de Fermi n'est pas plus importante que la taille typique des régions d'appariement. En clair, on ne peut pas avoir $\bar{\mu} \gg T_c^0$. Cette limitation est illustrée figure 1.6.

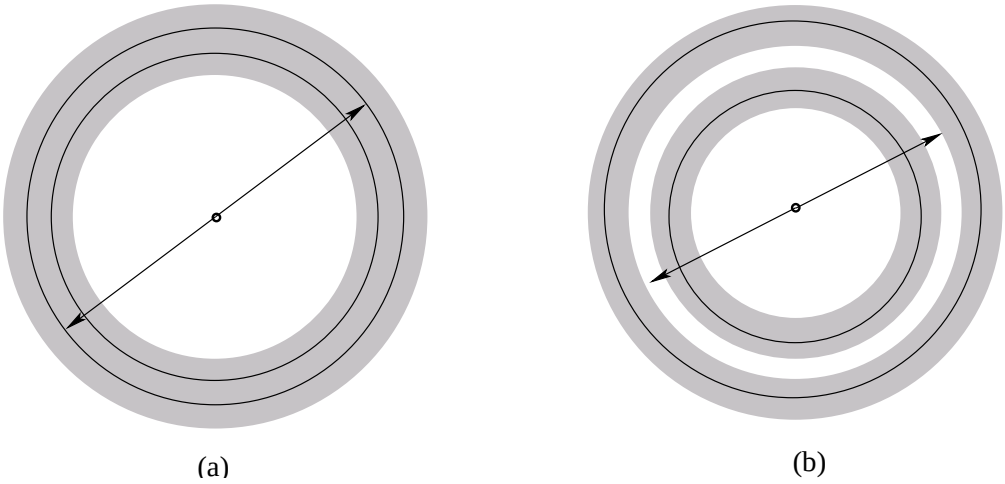


FIG. 1.6: Représentation des surfaces de Fermi des deux spins pour des potentiels chimiques différents. Les traits plein désignent les surfaces de Fermi, ils sont distants de $2\bar{\mu}$. Les domaines grisés correspondent aux régions d'appariement, leur extension est de l'ordre de T_c^0. (a) $2\bar{\mu} < T_c^0$, les régions d'appariement se recouvrent. (b) $2\bar{\mu} > T_c^0$, il n'y a pas de recouvrement entre les domaines privilégiés d'appariement, la formation d'une phase condensée est compromise.

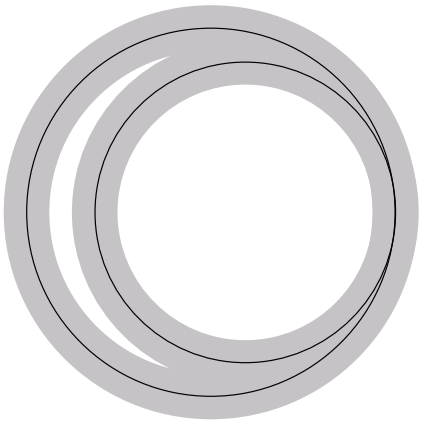


FIG. 1.7: Représentation des surfaces de Fermi des deux spins lorsque les paires ont un moment non nul $\mathbf{q}$. On translate l'une des deux surfaces du vecteur $\mathbf{q}$. La position d'un vecteur $-\mathbf{k}+\mathbf{q}$ par rapport à la surface de Fermi non translatée est la même que celle de $\mathbf{k}$ par rapport à la surface translatée. Les zones de recouvrement des domaines grisés sont propices à l'appariement car chacun des deux vecteurs d'onde impliqués est proche de sa surface de Fermi.

Dans le mécanisme d'apparition des phases FFLO, il y a brisure de l'invariance par translation car les paires de Cooper ont un moment total non nul. Cette brisure de symétrie, clairement défavorable lorsque $\bar{\mu}=0$, peut donner un appariement globalement plus favorable lorsque $\bar{\mu}\neq 0$ et ainsi augmenter légèrement le domaine d'existence de la phase condensée. En effet, le mécanisme de formation des paires de Cooper, qui couple les états $(\mathbf{k},\uparrow)$ et $(-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow)$, revient graphiquement à translater une des deux surfaces de Fermi du vecteur $\mathbf{q}$ puis à comparer les positions relatives des deux surfaces. La translation est représentée sur le schéma 1.7. On obtient finalement deux régions : une où les deux surfaces de Fermi sont proches et où l'appariement est efficace au détriment d'une région très défavorable au mécanisme d'appariement.

Cette image physique n'est pas suffisante pour conclure si ce type de mécanisme d'appariement est globalement plus favorable que le mécanisme BCS classique. Elle suggère simplement que la condensation BCS, lorsque les potentiels chimiques sont différents, possède une variable supplémentaire qui est la norme du vecteur d'onde $\mathbf{q}$. Par ailleurs, le schéma 1.7 permet de comprendre le rôle de la forme des surfaces de Fermi. Des surfaces presque plates peuvent donner des régions de coïncidence importantes et stabiliser encore les phases FFLO. On explique ainsi que le domaine d'existence FFLO est plus étendu à 2D qu'à 3D car le cylindre, contrairement à la sphère, a une direction plate. A 1D, le domaine d'existence des phases FFLO est même infini et la ligne de transition FFLO est telle que $\bar{\mu}\to+\infty$ lorsque $T\to 0$ [64, 65, 66]. On peut aussi prévoir qu'une surface de Fermi de forme carrée serait encore plus favorable aux phases FFLO.

1.4.2 Compétition énergétique

L'apparition des phases FFLO peut aussi s'interpréter comme le résultat d'une compétition énergétique entre l'énergie de condensation BCS et l'énergie de polarisation. Lorsque les potentiels chimiques des deux spins sont différents, le gaz tend à se polariser selon la différence de potentiel chimique $\bar{\mu}$. On définit alors la susceptibilité χ_N par :

$$N_\uparrow - N_\downarrow \equiv \chi_N \bar{\mu}, \tag{1.39}$$

et l'énergie du gaz est $E_0(\mu) - \chi_N \bar{\mu}^2$ où $E_0(\mu)$ est l'énergie du même gaz lorsque les potentiels chimiques des spins sont tous deux égaux à μ.

Pour illustrer la compétition énergétique, on va se placer à température nulle et comparer l'état fondamental BCS à l'état normal. Dans l'état normal, aucune contrainte n'empêche les fermions de se polariser. On traite donc l'état normal comme un gaz de fermions libres dont la susceptibilité est $\chi_N = N_0$ et l'énergie $E_0(\mu) - N_0\bar{\mu}^2$.

La stabilisation de l'état BCS par rapport à l'état normal est due à l'énergie de condensation des paires de Cooper. Cependant, par construction des paires de Cooper où chaque fermion de spin $\uparrow$ forme un état lié avec un fermion de spin $\downarrow$, l'état fondamental BCS comporte forcément le même nombre de fermions de spin $\uparrow$ et de spin $\downarrow$. Sa polarisation est donc nulle, et $\chi_N = 0$, car les spins sont bloqués par paires. La fonction d'onde BCS, qui décrit le condensat de paires à température nulle, n'est pas modifiée lorsqu'on introduit une différence de potentiel chimique $\bar{\mu}$. Elle ne s'adapte pas à la contrainte extérieure de polarisation correspondant à $\bar{\mu}$. Par conséquent, son énergie, égale à $E_0(\mu) - N_0\Delta_0^2/2$, devient supérieure à l'énergie de l'état normal au-delà du champ critique :

$$\mu_P = \frac{\Delta_0}{\sqrt{2}}, \tag{1.40}$$

La transition entre les deux états est du premier ordre (voir **encadré** 3), justement parce que l'état BCS ne s'adapte pas à la contrainte de polarisation. Cette transition est la limite de Clogston-Chandrasekhar, aussi appelée limite de Pauli. Dans les supraconducteurs, la différence de potentiels chimiques est due à un champ magnétique extérieur H : $\bar{\mu} = \mu_B H$. La limite de Pauli donne ainsi un champ magnétique critique, celui de l'équation (1.7) de la sous-section 1.2.1.

On peut étendre l'étude de la transition entre l'état normal et l'état BCS à température non nulle. L'état BCS est alors défini comme la solution homogène ($\mathbf{q} = \mathbf{0}$) de la théorie BCS telle que nous l'avons présentée. Le calcul est mené dans la sous-section 2.2.1 et le résultat présenté dans la figure 2.1.

La différence de potentiel chimique $\bar{\mu}$ exerce donc une contrainte énergétique sur le gaz de fermions qui s'oppose à la formation d'un condensat BCS. Contrairement à la fonction d'onde BCS, qui ne peut pas s'adapter à cette contrainte, le mécanisme d'appariement FFLO relâche légèrement la contrainte sur la polarisation en brisant des paires de Cooper [2] (nous reviendrons plus en détail sur ce point dans la sous-section 3.3.1). Cette brisure de paires donne un excédent de fermions de spin $\uparrow$ et augmente ainsi la susceptibilité du gaz. En contrepartie, l'énergie du centre de masse des paires de Cooper augmente (car $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$).

Solution inhomogène

Dans le chapitre 2, nous allons voir plus en détail la forme du paramètre d'ordre dans l'état condensé. Selon que les paires de Cooper sont au repos, comme c'est le cas dans le mécanisme classique BCS, ou en mouvement, comme dans le mécanisme FFLO, le paramètre d'ordre est homogène ou inhomogène. On peut retrouver cela à l'aide d'arguments simples. On suppose que toutes les paires de Cooper ont le même moment $\mathbf{q}_0$ pour leur centre de masse. La condensation de ces paires est à l'origine de l'apparition de valeurs moyennes non nulles de la forme $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{q}_0-\mathbf{k}} \rangle$ et on a de façon plus générale $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{q}_0-\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}_0}$. Par conséquent, le paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$ est de la forme :

$$\Delta(\mathbf{r}) \sim \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} \rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \left(\sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{q}_0-\mathbf{k}} \rangle \right) e^{i\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{r}}, \qquad (1.41)$$

c'est-à-dire qu'il varie spatialement dès lors que $\mathbf{q}_0 \neq \mathbf{0}$.

L'apparition d'une modulation spatiale dans la structure du paramètre d'ordre va aussi dans le sens d'une réaction à la compétition énergétique. Au voisinage des noeuds du paramètre d'ordre, qui peuvent apparaître par exemple pour une forme sinusoïdale, les paires de Cooper sont brisées et la susceptibilité devient non nulle. En contrepartie, on perd en énergie de condensation.

1.5 Conclusions

Après avoir détaillé le cadre du modèle BCS ainsi que son application aux supraconducteurs et aux gaz froids, nous avons considéré l'instabilité de l'état normal, à basse température, due à la formation de paires de Cooper. Cette instabilité est caractérisée, d'un point de vue technique, par l'apparition d'un pôle dans le propagateur de paires. L'étude de l'équation donnant l'instabilité dans le cas général où les populations spinorielles sont différentes révèle l'existence d'une variable supplémentaire par rapport à la théorie BCS classique qui est le moment du centre de masse de la paire de Cooper. Cette variable est nulle dans le cas où les deux potentiels chimiques sont égaux mais devient non nulle au-delà d'un champ critique et sous une température critique qui définissent tous deux la position du point tricritique du système. Nous avons par ailleurs montré que l'équation obtenue pour déterminer la température d'instabilité peut s'écrire sous une forme générale applicable aussi bien aux supraconducteurs qu'aux gaz froids, la spécificité des modèles apparaissant dans le calcul de la température critique absolue T_c^0. Nous concluons en donnant plusieurs interprétations physiques au mécanisme FFLO de formation des paires de Cooper.

Toutefois cette étude simple ne nous permet pas de décrire la phase condensée. On peut simplement prédire que l'état normal n'est pas stable en dessous d'une certaine température mais on ne peut pas prédire quelle sera la structure de l'état vers lequel cette instabilité conduit le système. En particulier, l'équation donnant l'instabilité fixe la norme de $\mathbf{q}$ mais pas sa direction. Les solutions sont donc dégénérées et forment une sphère dans l'espace des vecteurs d'onde $\mathbf{q}$. On obtient

la même dégénérescence sur la direction de **q** lorsqu'on étudie la transition en venant de la phase condensée (voir chapitre 2). En outre, les équations générales décrivant la phase condensée sont non linéaires mais deviennent linéaires juste à la transition. Ainsi, comme de nombreuses solutions sont dégénérées et que les équations sont linéaires, toute combinaison linéaire de solutions est aussi une solution. Il est par conséquent impossible de déterminer la structure du paramètre d'ordre juste à la transition. En rentrant dans la phase condensée, les premiers termes non linéaires des équations sont nécessaires pour lever cette dégénérescence et déterminer les structures les plus stables.

Il faut donc présenter une description générale de la phase condensée. C'est ce que nous allons faire dans le chapitre 2 dans le cadre de la théorie BCS. Ce point de vue est par ailleurs important pour traiter le cas d'une transition du premier ordre. En effet, l'instabilité FFLO que nous avons décrite, correspond à la transition entre l'état normal et les phases FFLO uniquement si cette transition est du second ordre. Si cette dernière transition est du premier ordre, alors la ligne d'instabilité donne seulement la limite de métastabilité de l'état normal. Les phases FFLO apparaissent à une température supérieure et de façon abrupte. Il est alors nécessaire d'étudier la transition en venant de la phase condensée.

Chapitre 2

Traitement BCS de la phase condensée

Dans le chapitre 1, nous avons mis en évidence l'existence d'une instabilité à basse température de l'état normal due à la formation de paires de Cooper. Nous allons maintenant aborder la description de la phase condensée dans le cadre de la théorie BCS. La particularité de la phase condensée dans l'approche BCS est la présence de valeurs moyennes anormales non nulles : $\langle\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\rangle \neq 0$, associées à l'existence des paires de Cooper dans la structure du condensat. L'interaction entre électrons est alors traitée dans l'esprit d'une théorie de champ moyen de Weiss, en faisant explicitement apparaître ces valeurs moyennes anormales.

Ce chapitre s'articule de la façon suivante : on commence par rappeler les principes de la théorie semi-phénoménologique de Landau pour décrire les excitations fermioniques du gaz d'électrons en interaction forte, puis on explique comment concilier cette théorie avec la théorie BCS dans le cadre de la formulation d'Eilenberger de la théorie BCS. Nous abandonnerons cependant pour la suite de cette première partie de la thèse sur les phases FFLO les effets des liquides de Fermi. La diagonalisation de l'hamiltonien effectif décrivant les électrons conduit aux équations de Bogoliubov-de Gennes qu'on ne sait résoudre analytiquement que pour l'état BCS homogène et pour l'onde plane de Fulde-Ferrell. On montre ensuite comment on peut obtenir les équations de Gorkov dans le formalisme de champ moyen d'Eilenberger puis comment on peut, à partir de ces équations, écrire un développement de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre. Nous étudierons plus spécifiquement deux développements, l'un s'applique au voisinage d'une transition du second ordre entre la phase normale et les phases FFLO, l'autre est valable dans le voisinage du point tricritique. Ces développement nous permettrons dans le chapitre 3 d'étudier la compétition entre différentes structures inhomogènes du paramètre d'ordre.

2.1 Formalisme BCS d'Eilenberger

2.1.1 Liquides de Fermi

Avant de présenter le formalisme BCS d'Eilenberger, nous revenons succinctement dans cette sous-section sur le traitement théorique de Landau des liquides de Fermi. Nous montrons ensuite une approche simple qui est équivalente à l'approche de Landau et qui permet de faire le lien avec le formalisme BCS. On a déjà présenté dans les sous-sections 1.1.1 et 1.1.2 le principe de la théorie de Landau des liquides de Fermi qui permet de traiter les excitations de basse énergie d'un gaz de fermions en interaction forte. A basse température, le système peut être décrit par un gaz de quasiparticules tant qu'on se restreint aux état de basse énergie qui sont au voisinage de la surface de Fermi. L'énergie E du gaz est alors donnée par :

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_\sigma)\ \delta n_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'} \delta n_{\mathbf{k},\sigma}\ f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\ \delta n_{\mathbf{k}',\sigma'} \tag{2.1}$$

où E_0 est l'énergie du gaz à température nulle et $\delta n_{\mathbf{k},\sigma} = n_{\mathbf{k},\sigma} - \theta(k_F - |\mathbf{k}|)$ est le facteur d'occupation de l'état de quasiparticule ($\mathbf{k}$,σ) par rapport à l'état fondamental. Les fonctions $f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ décrivent les interactions entre les quasiparticules. Comme on se restreint au voisinage de la surface de Fermi, il est raisonnable de négliger leur dépendance en la norme des vecteurs $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$. Il reste la dépendance en l'angle entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ qu'on peut développer suivant les polynômes de Legendre [6]. Pour simplifier, on ne gardera que les termes en $l = 0$ pour lesquels les fonctions $f_{\sigma,\sigma'}$ ne dépendent pas de l'angle entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$.

En posant $F_s^0 \equiv N_0(f_{\uparrow,\uparrow}^0 + f_{\downarrow,\uparrow}^0)$ et $F_a^0 \equiv N_0(f_{\uparrow,\uparrow}^0 - f_{\downarrow,\uparrow}^0)$, on obtient finalement l'expression suivante pour l'énergie :

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_\sigma)\ \delta n_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{4N_0} \left[F_a^0 (\delta n_\uparrow - \delta n_\downarrow)^2 + F_s^0 (\delta n_\uparrow + \delta n_\downarrow)^2 \right] \tag{2.2}$$

où $\delta n_\sigma = \sum_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k},\sigma}$ est la densité pour un spin donné. L'énergie d'une quasiparticule est donnée par :

$$\bar{\epsilon}_{\mathbf{k},\sigma} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{F_s^0}{2N_0}(\delta n_\uparrow + \delta n_\downarrow) + \frac{F_a^0}{2N_0}(\delta n_\sigma - \delta n_{-\sigma}). \tag{2.3}$$

L'énergie d'une quasiparticule dépend donc de la densité des autres quasiparticules que l'on détermine de façon cohérente. L'approche de Landau ressemble d'un point de vue formel à une approche en champ moyen même si elle n'en est pas une car les paramètres de Landau F_s^0 et F_a^0 n'ont pas de raison d'être petits devant 1.

Approche simplifiée

Nous résumons ici un formalisme qui permet de redériver les résultats de la théorie des liquides de Fermi de Landau tout en nous donnant par la suite la possibilité d'étendre la méthode à la description de la phase condensée BCS. On

écrit un hamiltonien effectif qui décrit les quasiparticules proches de la surface de Fermi :

$$h = \int d\mathbf{r} \Bigg\{ \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2_{\mathbf{r}}}{2m} - \mu_\sigma \right) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) + m_s(\mathbf{r}) \left(\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) + \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) \right) + m_a(\mathbf{r}) \left(\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) - \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) \right) \Bigg\}. \tag{2.4}$$

Dans cet hamiltonien, l'interaction entre quasiparticules est décrite par les champs moléculaires $m_s(\mathbf{r})$ et $m_a(\mathbf{r})$ comme dans une théorie de champ moyen [67]. La partie sans interaction (obtenue pour $m_s(\mathbf{r}) = m_a(\mathbf{r}) = 0$) est notée H_0. L'hamiltonien (2.4) est celui d'un gaz de fermions libres dont on calcule l'entropie selon :

$$S = -\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_\mathrm{h} \ln(\hat{\rho}_\mathrm{h})\right] \qquad \text{avec} \qquad \hat{\rho}_\mathrm{h} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta \mathrm{h}}}{\mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\beta \mathrm{h}})}. \tag{2.5}$$

Il reste pour calculer l'énergie libre du gaz à déterminer la valeur moyenne du terme d'énergie d'interaction entre les électrons noté H_I.

Dans une théorie de champ moyen de type Weiss, la valeur moyenne est calculée avec l'opérateur densité de l'équation (2.5). Pour une interaction locale comme celle de l'hamiltonien BCS (1.5), on obtient :

$$\langle H_I \rangle = -g \int d\mathbf{r}\ \langle \hat{\psi}^\dagger_\uparrow \hat{\psi}^\dagger_\downarrow \hat{\psi}_\downarrow \hat{\psi}_\uparrow \rangle = -g \int d\mathbf{r}\ \langle \hat{\psi}^\dagger_\uparrow \hat{\psi}_\uparrow \rangle \langle \hat{\psi}^\dagger_\downarrow \hat{\psi}_\downarrow \rangle \tag{2.6}$$

ce qui correspond aussi au résultat d'un développement perturbatif valable pour $N_0\ g \ll 1$.

Dans le cas des liquides de Fermi, les interactions sont fortes et l'approche perturbative n'est pas correcte. A la place, on obtient le développement suivant :

$$\langle H_I \rangle = \frac{1}{4N_0} \int d\mathbf{r}\ \left[F^0_s \left(\langle \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle + \langle \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) \rangle \right)^2 + F^0_a \left(\langle \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle - \langle \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) \rangle \right)^2 \right], \tag{2.7}$$

qui reproduit le résultat (2.2) de la théorie de Landau. En particulier, on n'a pas besoin de préciser la forme de l'interaction élémentaire entre fermions.

La minimisation de l'énergie libre (voir **encadré** 2) conduit aux relations suivantes :

$$m_s(\mathbf{r}) = \frac{F^0_s}{2N_0} \left(\langle \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle + \langle \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) \rangle \right) \tag{2.8a}$$

$$m_a(\mathbf{r}) = \frac{F^0_a}{2N_0} \left(\langle \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle - \langle \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) \rangle \right) \tag{2.8b}$$

Encadré 2 : Minimisation de l'énergie libre

L'expression de l'énergie libre dépend des champs moléculaires $m_s(\mathbf{r})$ et $m_a(\mathbf{r})$:

$$\bar{F} = \langle H \rangle - T\,S = \langle H - h \rangle + F_h, \tag{B2-1}$$

avec $F_h = \langle h \rangle - TS = -T \ln \mathrm{Tr}(e^{-\beta h})$. $H = H_0 + H_I$ est l'hamiltonien réel des fermions. Le calcul (2.7) de la valeur moyenne de H_I conduit à l'expression :

$$\bar{F} = F_h + \int \left(\frac{F_s^0}{4N_0} n_s^2 - m_s n_s + \frac{F_a^0}{4N_0} n_a^2 - m_a n_a \right), \tag{B2-2}$$

où l'on a posé $n_s \equiv \langle \hat{\psi}_\uparrow^\dagger \hat{\psi}_\uparrow + \hat{\psi}_\downarrow^\dagger \hat{\psi}_\downarrow \rangle = \partial_{m_s} F_h$ et $n_a \equiv \langle \hat{\psi}_\uparrow^\dagger \hat{\psi}_\uparrow - \hat{\psi}_\downarrow^\dagger \hat{\psi}_\downarrow \rangle = \partial_{m_a} F_h$. Les valeurs moyennes sont calculées avec l'opérateur densité (2.5) si bien que n_s et n_a sont des fonctions de m_s et de m_a qu'on n'explicitera pas. L'extremisation de l'énergie libre donne l'équation :

$$d\bar{F} = \int d\mathbf{r} \left[\left(\frac{F_s^0 n_s}{2N_0} - m_s \right) dn_s(\mathbf{r}) + \left(\frac{F_a^0 n_a}{2N_0} - m_a \right) dn_a(\mathbf{r}) \right] = 0, \tag{B2-3}$$

ce qui implique les relations (2.8). Dans la pratique, on utilise une énergie libre dont la forme analytique est plus commode que $\bar{F}$. On la définie par :

$$F = \bar{F} - \frac{N_0}{F_s^0} \int \left(m_s - \frac{F_s^0 n_s}{2N_0} \right)^2 - \frac{N_0}{F_a^0} \int \left(m_a - \frac{F_a^0 n_a}{2N_0} \right)^2. \tag{B2-4}$$

F et $\bar{F}$ satisfont aux mêmes équations de stationnarité et sont égales lorsque les équations (2.8) sont vérifiées. (B2-2) et (B2-4) conduisent finalement à :

$$F = F_h - (N_0/F_s^0) \int d\mathbf{r}\; m_s(\mathbf{r})^2 - (N_0/F_a^0) \int d\mathbf{r}\; m_a(\mathbf{r})^2. \tag{B2-5}$$

L'ajout de la théorie BCS ne pose pas de difficulté de principe. On ajoute à l'équation (B2-2) les termes :

$$\int d\mathbf{r} \left(\Delta(\mathbf{r}) m^*(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}) - g|m(\mathbf{r})|^2 \right), \tag{B2-6}$$

où l'on a posé $m^* \equiv \langle \hat{\psi}_\uparrow^\dagger \hat{\psi}_\downarrow^\dagger \rangle = -\partial_\Delta F_h$. On obtient un terme supplémentaire dans les équations d'extremisation de l'énergie libre :

$$\int d\mathbf{r}\; \left[(\Delta(\mathbf{r}) - g m(\mathbf{r}))\, dm^*(\mathbf{r}) + c.c. \right] = 0, \tag{B2-7}$$

qui conduit à l'équation (2.14). On rajoute à l'énergie libre F le terme supplémentaire $(1/g) \int |\Delta - gm|^2$ et on obtient finalement :

$$F = F_h - \frac{N_0}{F_s^0} \int d\mathbf{r}\; m_s(\mathbf{r})^2 - \frac{N_0}{F_a^0} \int d\mathbf{r}\; m_a(\mathbf{r})^2 + \frac{1}{g} \int d\mathbf{r} |\Delta(\mathbf{r})|^2. \tag{B2-8}$$

2.1.2 Hamiltonien effectif BCS

Dans l'approche originelle BCS, les auteurs utilisent, pour décrire les électrons, l'hamiltonien (1.5), que l'on récrit ici :

$$H = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int d\mathbf{r}\ \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2_{\mathbf{r}}}{2m} - \mu_\sigma \right) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) - g \int d\mathbf{r}\ \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}), \tag{2.9}$$

hamiltonien à partir duquel ils cherchent à décrire l'état fondamental puis les états excités. L'idée générale de leur approche est variationnelle, c'est-à-dire qu'ils supposent que l'état fondamental a une forme particulière, forme qui contient physiquement l'idée de condensat de paires de Cooper, puis ils minimisent l'énergie de façon à déterminer les coefficients apparaissant dans la forme du fondamental. Dans ce chapitre, nous allons présenter la reformulation de la théorie BCS due à Eilenberger [68]. Celle-ci donne exactement les mêmes résultats que l'approche BCS et est basée sur le même principe variationnel. Il s'agit de remplacer l'hamiltonien par un hamiltonien effectif qui décrit les effets de la condensation des paires de Cooper tout en ayant une forme très simple. Cet hamiltonien effectif dépend du paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$ qui est le paramètre variationnel de la théorie. On le détermine en minimisant l'énergie libre. Physiquement, la justification de l'approche variationnelle BCS est due à la taille des paires de Cooper qui est beaucoup plus grande que la distance moyenne entre électrons. Chaque paire de Cooper interagit donc avec le *champ moyen* créé par les autres paires et décrit par le paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$.

L'hamiltonien effectif d'Eilenberger est construit à partir de (2.9) en remplaçant le terme d'interaction entre par

$$-\int d\mathbf{r}\ \left(\Delta(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \right) \tag{2.10}$$

qui brise la symétrie $U(1)$ de (2.9) et introduit explicitement l'appariement anormal dû à la condensation des paires de Cooper.

Avec cette forme pour l'hamiltonien effectif, on peut calculer la valeur moyenne du terme d'interaction de l'hamiltonien BCS (2.9) en utilisant l'opérateur densité $\hat{\rho}_{h_{\rm eff}} = e^{-\beta h_{\rm eff}}/{\rm Tr}(\mathrm{e}^{-\beta \mathrm{h}_{\rm eff}})$, où $h_{\rm eff}$ désigne l'hamiltonien effectif. On obtient la contribution suivante pour la valeur moyenne du terme d'interaction :

$$-g\langle \hat{\psi}^\dagger_\uparrow \hat{\psi}^\dagger_\downarrow \hat{\psi}_\downarrow \hat{\psi}_\uparrow \rangle = -g \langle \hat{\psi}^\dagger_\uparrow \hat{\psi}^\dagger_\downarrow \rangle \langle \hat{\psi}_\downarrow \hat{\psi}_\uparrow \rangle \tag{2.11}$$

On peut aisément inclure les effets des liquides de Fermi dans l'approche d'Eilenberger en combinant les deux approches. Le nouvel hamiltonien effectif prend la forme suivante :

$$h = H_0 + \int \left[m_s \left(\hat{\psi}^\dagger_\uparrow \hat{\psi}_\uparrow + \hat{\psi}^\dagger_\downarrow \hat{\psi}_\downarrow \right) + m_a \left(\hat{\psi}^\dagger_\uparrow \hat{\psi}_\uparrow - \hat{\psi}^\dagger_\downarrow \hat{\psi}_\downarrow \right) - \Delta \hat{\psi}^\dagger_\uparrow \hat{\psi}^\dagger_\downarrow - \Delta^* \hat{\psi}_\downarrow \hat{\psi}_\uparrow \right], \tag{2.12}$$

ce qui correspond à sommer les équations (2.4) et (2.10). L'appariement BCS ajoute simplement un champ moléculaire $\Delta(\mathbf{r})$ dont la forme est obtenue par

minimisation de l'énergie libre. La valeur moyenne du terme d'interaction est elle donnée par :

$$\langle H_I\rangle = \int \left[\frac{F_s^0}{4N_0}\left(\langle\hat\psi_\uparrow^\dagger\hat\psi_\uparrow\rangle + \langle\hat\psi_\downarrow^\dagger\hat\psi_\downarrow\rangle\right)^2 + \frac{F_a^0}{4N_0}\left(\langle\hat\psi_\uparrow^\dagger\hat\psi_\uparrow\rangle - \langle\hat\psi_\downarrow^\dagger\hat\psi_\downarrow\rangle\right)^2 - g\langle\hat\psi_\downarrow^\dagger\hat\psi_\uparrow^\dagger\rangle\langle\hat\psi_\uparrow\hat\psi_\downarrow\rangle\right], \tag{2.13}$$

ce qui correspond à ajouter aux termes d'interaction habituels des liquides de Fermi la partie anormale due au condensat BCS. La minimisation de l'énergie libre donne en conclusion les équations (2.8) ainsi que :

$$\Delta(\mathbf{r}) = g\langle\hat\psi_\downarrow(\mathbf{r})\hat\psi_\uparrow(\mathbf{r})\rangle. \tag{2.14}$$

Finalement, l'utilisation de l'hamiltonien BCS (2.9) se justifie si l'on cherche à décrire uniquement l'effet d'appariement entre électrons, c'est-à-dire si l'on néglige les effets des liquides de Fermi. Autrement, il faut conserver un terme d'interaction entre électrons dont la forme est plus générale. Dans la théorie BCS, l'interaction d'appariement est faible ($N_0\ g \ll 1$) mais rien n'empêche les coefficients des liquides de Fermi d'être franchement non négligeables ($F_s^0 \sim 1$ et $F_a^0 \sim 1$).

Dans la suite de cette première partie de la thèse, on se restreint aux cas où les coefficients des liquides de Fermi sont négligeables. L'énergie libre est alors donnée par $F = F_h + \int |\Delta|^2/g$ et seule la contribution (2.10) intervient dans le terme d'interaction de l'hamiltonien effectif h (on est ramené à la formulation BCS d'Eilenberger [68]).

2.1.3 Diagonalisation de h

La diagonalisation de l'hamiltonien effectif peut se faire exactement sachant que celui-ci est quadratique dans les champs $\hat\psi$ et $\hat\psi^\dagger$. On applique une transformation unitaire [69, 70] aux opérateurs champs :

$$\begin{pmatrix}\hat\psi_\uparrow\\ \hat\psi_\downarrow^\dagger\end{pmatrix} \equiv \sum_s \begin{pmatrix}u_s\\ v_s\end{pmatrix}\hat b_{s,1} + \begin{pmatrix}v_s^*\\ -u_s^*\end{pmatrix}\hat b_{s,2}^\dagger. \tag{2.15}$$

Les modes (u_s, v_s) sont les solutions des équations de Bogoliubov-de Gennes :

$$\begin{pmatrix}-\frac{\hbar^2\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} - \mu & -\Delta(\mathbf{r})\\ -\Delta^*(\mathbf{r}) & -\left(-\frac{\hbar^2\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} - \mu\right)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_s\\ v_s\end{pmatrix} = \epsilon_s\begin{pmatrix}u_s\\ v_s\end{pmatrix} \tag{2.16}$$

normalisées selon $\int d\mathbf{r}|u_s|^2+|v_s|^2 = 1$. Si (u_s, v_s) est une solution de (2.16) d'énergie ϵ_s alors $(v_s^*, -u_s^*)$ est aussi solution de (2.16) avec l'énergie $-\epsilon_s$. La condition de normalisation précédente permet de se restreindre aux solutions d'énergie positive.

Les opérateurs $\hat b_{s,1}$ et $\hat b_{s,2}$ définis par (2.15) satisfont aux relations d'anticommutation de deux opérateurs fermioniques de particules indépendantes :

$$\{\hat b_{s,i}, \hat b_{s',j}^\dagger\} = \delta_{s,s'}\delta_{i,j} \tag{2.17a}$$

$$\{\hat b_{s,i}, \hat b_{s',j}\} = 0 \tag{2.17b}$$

où δ désigne la fonction delta de Kronecker et $\{A, B\}$ l'anticommutateur $AB+BA$ des opérateurs A et B. L'hamiltonien h donné par (2.4) est diagonalisé par la transformation unitaire (2.15). Le calcul utilise les équations (2.16) ainsi que les relations de commutation (2.17) et conduit à

$$h = \sum_s \left[(\epsilon_s - \bar{\mu}) \hat{b}^\dagger_{s,1} \hat{b}_{s,1} + (\epsilon_s + \bar{\mu}) \hat{b}^\dagger_{s,2} \hat{b}_{s,2} \right] - 2 \sum_s \epsilon_s \int d\mathbf{r} |v_s(\mathbf{r})|^2. \tag{2.18}$$

h est maintenant l'hamiltonien d'un ensemble d'excitations fermioniques libres d'énergies $\epsilon_s \pm \bar{\mu}$. Ces excitations sont décrites par les opérateurs de création (annihilation) $\hat{b}^\dagger_{s,1}$ ($\hat{b}_{s,1}$) et $\hat{b}^\dagger_{s,2}$ ($\hat{b}_{s,2}$).

La fonction de partition et l'énergie libre correspondant à h sont alors celles d'un gaz parfait. On obtient

$$F = -\sum_{\pm,s} T \ln \left[1 + e^{-\beta(\epsilon_s \pm \bar{\mu})} \right] - 2 \sum_s \epsilon_s \int d\mathbf{r} |v_s(\mathbf{r})|^2 + \int d\mathbf{r} \, \frac{|\Delta(\mathbf{r})|^2}{g}. \tag{2.19}$$

L'hamiltonien effectif h n'ayant un sens que pour les modes au voisinage de la surface de Fermi, on soustrait à cette énergie celle de l'état fondamental de façon à faire disparaître la contribution des états proches de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. On note $\Delta F(\{\Delta(\mathbf{r})\}) = F(\{\Delta(\mathbf{r})\}) - F(\Delta = 0)$. $\Delta F(\{\Delta(\mathbf{r})\})$ dépend d'une fonction et non d'un ensemble fini de variables. Dans tous les cas abordés dans cette thèse, nous avons donc dû nous restreindre à un sous-espace particulier de fonctions pour le paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$. Il est alors nécessaire de justifier physiquement le choix de ce sous-espace et de montrer pourquoi il contient probablement le vrai minimum. Par ailleurs, l'équation du gap (2.14), qui correspond à une minimisation de l'énergie, s'avère souvent être un outil puissant dans la recherche du minimum.

Il reste deux difficultés de taille pour résoudre notre problème, il faut résoudre les équations de Bogoliubov-de Gennes (2.16) pour une forme générale de $\Delta(\mathbf{r})$, puis il faut minimiser l'énergie libre afin de déterminer la forme optimale du paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$.

2.2 Traitement de cas simples

L'état normal s'obtient en prenant $\Delta = 0$. Les modes propres des équations de Bogoliubov-de Gennes (2.16) sont alors de la forme

$$\begin{pmatrix} u_\mathbf{k} \\ v_\mathbf{k} \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \theta(|\mathbf{k}| - k_F) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \theta(k_F - |\mathbf{k}|), \tag{2.20}$$

(on a pris le volume du système V égal à 1 pour simplifier) l'énergie propre correspondante étant $\epsilon_\mathbf{k} = \hbar^2 |\mathbf{k}^2 - k_F^2|/2m$. On obtient pour l'énergie libre à la limite thermodynamique

$$F(\Delta = 0) = -T \sum_\pm \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \ln \left[1 + e^{-\beta(\epsilon_\mathbf{k} \pm \bar{\mu})} \right] - 2 \int_{|\mathbf{k}|<k_F} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \epsilon_\mathbf{k}, \tag{2.21}$$

formule qu'on peut aussi obtenir directement pour un gaz de fermions libres.

Nous allons maintenant voir deux cas où les équations de Bogoliubov sont solubles et où on peut calculer l'énergie libre.

2.2.1 Solution homogène

La solution homogène, c'est-à-dire correspondant à Δ constant dans l'espace, est la solution naturelle qui apparaît pour $\bar{\mu} = 0$. Elle correspond à des paires de Cooper qui condensent dans un état d'impulsion total nul. Nous allons étudier la compétition entre cet état et l'état normal dans le plan $(\bar{\mu}, T)$. Nous allons notamment retrouver la transition du premier ordre correspondant à la limite de Clogston-Chandrasekhar vue dans la sous-section 1.4.2.

La phase de Δ ne change rien à la physique. On choisit donc Δ réel. Les solutions des équations de Bogoliubov-de Gennes (2.16) sont de la forme $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \bar{u}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ et $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \bar{v}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ avec

$$\bar{u}_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \qquad \bar{v}_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right), \tag{2.22}$$

où l'on a posé $\xi_{\mathbf{k}} = \hbar^2(\mathbf{k}^2 - k_F^2)/2m$. $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$ est l'énergie propre du mode d'impulsion $\mathbf{k}$. La différence d'énergie libre avec l'état normal est

$$\Delta F = \sum_{\mathbf{k}} (|\xi_{\mathbf{k}}| - E_{\mathbf{k}}) - T \sum_{\pm,\mathbf{k}} \ln\left[\frac{1 + e^{-\beta(E_{\mathbf{k}} \pm \bar{\mu})}}{1 + e^{-\beta(\xi_{\mathbf{k}} \pm \bar{\mu})}}\right] + \frac{\Delta^2}{g}. \tag{2.23}$$

Dans la limite thermodynamique et en intégrant au voisinage de la surface de Fermi, on obtient :

$$\frac{\Delta F}{N_0} = 2\int_0^{\hbar\omega_c} d\epsilon\,(\epsilon - E) - 2T \sum_{\pm} \int_0^{+\infty} d\epsilon \ln\left[\frac{1 + e^{-\beta(E \pm \bar{\mu})}}{1 + e^{-\beta(\epsilon \pm \bar{\mu})}}\right] + \frac{\Delta^2}{\lambda}, \tag{2.24}$$

où il faut comprendre $E \equiv \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}$. L'extremisation de ΔF par rapport à Δ^2 redonne l'équation du gap (2.14) qu'on récrit sous la forme :

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\hbar\omega_c} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}}(1 - f_- - f_+), \tag{2.25}$$

avec $f_\pm = \left(1 + e^{\beta(E \pm \bar{\mu})}\right)^{-1}$. Afin d'éliminer la coupure en $\hbar\omega_c$, on écrit cette équation du gap pour la transition standard BCS, c'est-à-dire pour $\bar{\mu} = 0$, $\Delta = 0$ et $T = T_c^0$.

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\hbar\omega_c} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T_c^0}\right) \simeq \ln\left(\frac{A\hbar\omega_c}{T_c^0}\right), \tag{2.26}$$

où $A = 2e^C/\pi = 1.133\ldots$ On soustrait (2.26) à (2.25) :

$$\ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) = \int_0^{+\infty} d\epsilon \left[\frac{\sum_\pm \tanh(\beta(E \pm \bar{\mu})/2)}{E} - \frac{\tanh(\beta\epsilon/2)}{\epsilon}\right]. \tag{2.27}$$

Encadré 3 : Théorie de Landau des transition de phase

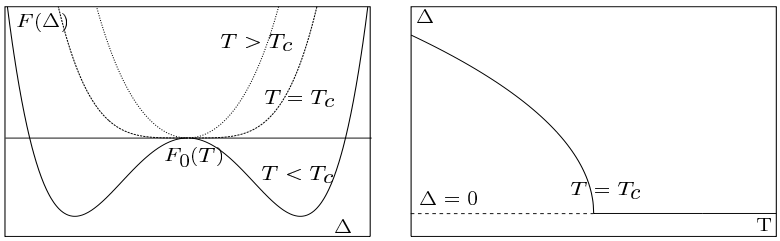
Un prérequis à la théorie de Landau est l'existence d'un paramètre d'ordre Δ, non nul dans une phase et nul dans l'autre. Cette différence indique souvent un changement de symétrie entre les deux phases. L'hypothèse de Landau est que l'on peut développer l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre :

$$F(\Delta, T) = F_0(T) + F_2(T)\Delta^2 + F_4(T)\Delta^4 + F_6(T)\Delta^6 + \cdots \qquad \text{(B3-1)}$$

pour Δ petit, F_0 désignant la phase haute température. L'état le plus stable est donné par le minimum de l'énergie libre F. Nous nous sommes restreint à un cas particulier ($F(\Delta)$ paire, développement jusqu'au 6^{e} ordre) ce qui n'enlève rien à la généralité des deux types de transition que l'on va mettre en évidence.

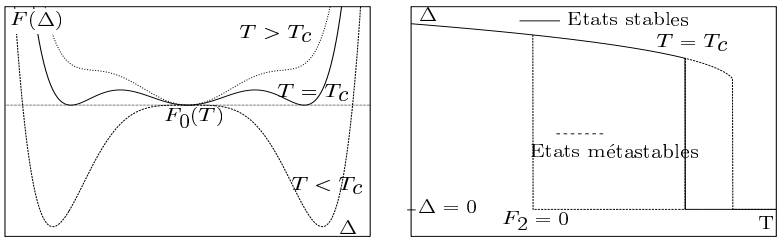
• $F_4 > 0$: transition du second ordre.

La transition est donnée par $F_2(T = T_c) = 0$. Le paramètre d'ordre est continu à la transition et est donné par $\Delta = \sqrt{-F_2(T)/2F_4(T_c)}$ juste en dessous de la transition. En dessous de la température de transition T_c, l'énergie a la forme d'un *chapeau mexicain* et ses minima s'écartent continûment de $\Delta = 0$ lorsque T décroît.



• $F_4 < 0$: transition du premier ordre.

Dans ce cas, il y apparition d'un second minimum local (métastable) dans l'énergie pour des températures supérieures à la température de transition T_c. Il y a transition lorsque ce minimum atteint l'énergie $F_0(T)$ de la phase haute température pour $F_2(T = T_c) > 0$. Le paramètre d'ordre n'est donc pas continu à la transition. La présence de minima locaux mais non globaux correspond à des états métastables.



Cette analyse peut s'étendre à une énergie libre dépendant de plusieurs variables ; soit plusieurs paramètres d'ordre, soit un paramètre d'ordre complexe, soit un paramètre d'ordre variant spatialement, etc.

La constante de couplage λ et la coupure ont disparu de cette expression. La dernière étape consiste à développer tanh sur ses pôles selon la formule :

$$\frac{1}{2}\tanh\left(\frac{\beta x}{2}\right) = T\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{x - i\omega_n} \tag{2.28}$$

avec les fréquences de Matsubara $\omega_n = \pi T(2n+1)$. L'équation du gap se récrit :

$$\ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) = 2\pi T\,\mathrm{Re}\sum_{n=0}^{+\infty}\left(\frac{1}{\sqrt{(\omega_n - i\bar{\mu})^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{\omega_n}\right). \tag{2.29}$$

Dans la limite $\Delta \to 0$ correspondant à une transition du deuxième ordre, on retrouve l'équation d'instabilité FFLO (1.31) (pour $\bar{q} = 0$). On trouve ici une première confirmation de la cohérence entre le calcul d'instabilité du chapitre 1 où on approche la transition en venant de la phase normale et les calculs de ce chapitre où la transition est approchée depuis la phase condensée. L'approche BCS est donc cohérente avec la resommation diagrammatique des échelles.

L'énergie libre peut s'obtenir simplement en intégrant l'expression (2.29) de l'équation du gap par rapport à Δ^2 :

$$\Omega \equiv \frac{\Delta F}{N_0} = \ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right)\Delta^2 + 2\pi T\,\mathrm{Re}\sum_{n=0}^{+\infty}\left(\frac{\Delta^2}{\omega_n} - 2\sqrt{\Delta^2 + (\omega_n - i\bar{\mu})^2} + 2\omega_n\right). \tag{2.30}$$

L'expression obtenue pour l'énergie (2.30) ainsi que l'équation du gap (2.29) permettent de déterminer numériquement la valeur optimale de Δ en chaque point du plan $(\bar{\mu}, T)$ ainsi que l'énergie libre correspondante. On peut ainsi déterminer la ligne de transition entre l'état normal et l'état condensé. Cette ligne est représentée figure 2.1 et elle ne dépend pas de la dimension d'espace. La transition est du second ordre pour des températures supérieures à la température du point tricritique T_c (voir 1.3.3) et du premier ordre pour des températures inférieures [1]. Ceci se comprend bien dans le cadre de la théorie des transitions de Landau (voir **encadré** 3). Le développement de l'énergie libre (2.30) en fonction de Δ donne ainsi $\Omega = a_0\Delta^2 - a_2\Delta^4/4 + a_4\Delta^6/8$ avec

$$a_0(\bar{\mu}, T) = \ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) + 2\pi T\,\mathrm{Re}\sum_{n=0}^{+\infty}\left(\frac{1}{\omega_n} - \frac{1}{\omega_n - i\bar{\mu}}\right), \tag{2.31}$$

$$a_2(\bar{\mu}/T) = -2\bar{\mu}^2\pi T\mathrm{Re}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{(\omega_n - i\bar{\mu})^3}, \tag{2.32}$$

$$a_4(\bar{\mu}/T) = -2\bar{\mu}^4\pi T\mathrm{Re}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{(\omega_n - i\bar{\mu})^5}, \tag{2.33}$$

où Δ est exprimé en unité de $\bar{\mu}$ et Ω en unité de $\bar{\mu}^2$. $a_0(\bar{\mu}, T) = 0$ donne la ligne de transition lorsque celle-ci est du second ordre. On atteint le point tricritique

[1] l'expression *point tricritique* provient en fait de ce changement d'ordre de la transition.

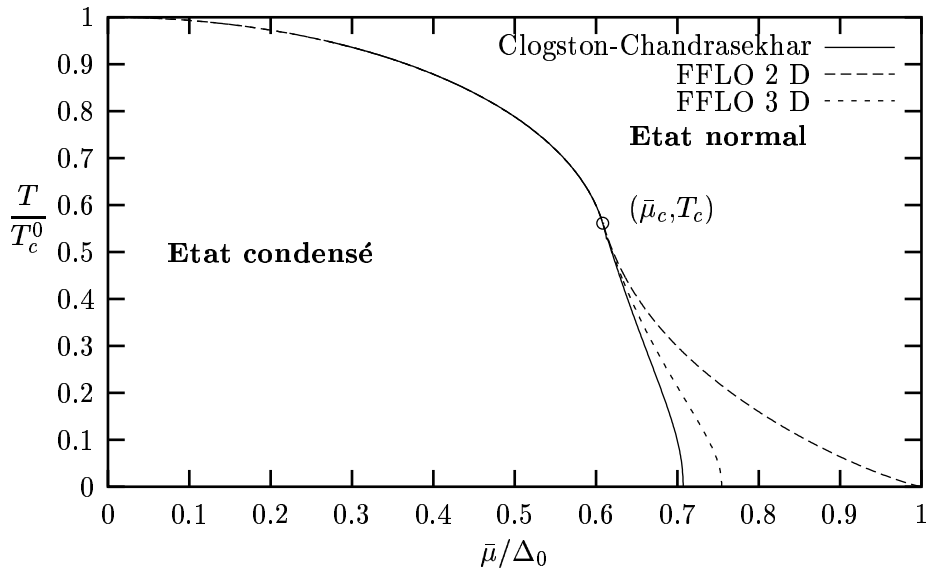


FIG. 2.1: Limite de Clogston-Chandrasekhar correspondant à une transition entre l'état normal et l'état condensé homogène. On a tracé pour comparaison les lignes d'instabilité FFLO déterminées au chapitre 1 à 2D et 3D. Au dessus du point tricritique, cette transition est du deuxième ordre et elle est confondue avec les courbes d'instabilité. En dessous du point tricritique, la transition devient du premier ordre en même temps qu'apparaissent les phases FFLO.

sur la ligne $a_0(\bar{\mu}, T) = 0$ pour $a_2(\bar{\mu}/T) = 0$. On retrouve d'ailleurs par ce raisonnement les mêmes équations que celles donnant le point d'apparition des phases FFLO (voir le 1.3.3). Pour des températures plus petites que T_c, $a_2 > 0$ et la transition vers l'état condensé homogène est du premier ordre (voir **encadré** 3) ; en particulier, $a_0 > 0$ à la transition.

Ainsi, en dessous du point tricritique, la courbe $a_0 = 0$ se détache de la ligne de transition (ou limite de Clogston-Chandrasekhar). C'est la ligne spinodale [2]. Elle correspond à l'instabilité de l'état normal vis-à-vis d'une phase homogène, c'est-à-dire qu'elle correspond à une instabilité FFLO dans le cas particulier où $\bar{q} = 0$. La ligne spinodale est comparée à la transition de Clogston-Chandrasekhar sur la figure 2.2.

L'exacte coïncidence entre le point d'apparition des phases FFLO et le point tricritique où la transition vers la phase condensée homogène change d'ordre est une particularité de la théorie de couplage faible. Elle disparaît notamment si l'on inclut les effets de liquide de Fermi [37].

[2]Lorsqu'une transition est du premier ordre, l'état stable à haute température reste métastable même en dessous de la température critique de transition car il reste un minimum local de l'énergie. La ligne spinodale correspond à la limite de métastabilité de cet état.

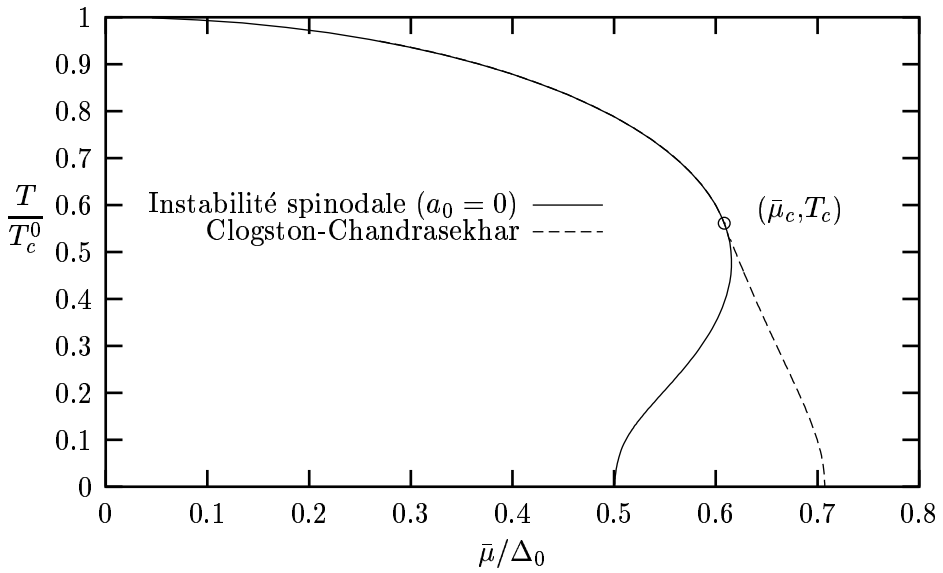


FIG. 2.2: Instabilité spinodale ($a_0 = 0$) comparée à la limite de Clogston-Chandrasekhar.

Calcul à température nulle

On peut faire un calcul plus explicite de l'énergie (2.30) à température nulle en intégrant sur les fréquences. On obtient

$$\begin{aligned}\Omega = &\frac{\Delta^2}{2}\ln\left(\frac{\Delta}{\Delta_0}\right)^2 + \bar{\mu}^2 - \frac{\Delta^2}{2} \\ &+ \theta(\bar{\mu}-\Delta)\left[\Delta^2 \ln\left(\frac{\bar{\mu}+\sqrt{\bar{\mu}^2-\Delta^2}}{\Delta}\right) - \sqrt{\bar{\mu}^2-\Delta^2}\right],\end{aligned} \tag{2.34}$$

où θ est la fonction de Heavyside. On constate que pour $\bar{\mu} < \Delta$, la minimisation de l'énergie libre ne dépend pas de la valeur de $\bar{\mu}$. Celle-ci conduit à $\ln(\Delta/\Delta_0) = 0$ ou encore $\Delta = \Delta_0$: le paramètre d'ordre est constant même lorsqu'on écarte les surfaces de Fermi. Une fois minimisée, l'énergie libre est donnée par $\Omega_{\rm m} = \bar{\mu}^2 - \Delta_0^2/2$, ce qui donne une transition du premier ordre pour $\bar{\mu} = \Delta_0/\sqrt{2}$. On retrouve les résultats de la sous-section 1.4.2 qu'on avait obtenus à partir d'arguments simples afin d'expliquer la limite de Clogston-Chandrasekhar.

2.2.2 État de Fulde-Ferrell

La dérivation du paragraphe précédent peut se généraliser aisément à une onde plane pour le paramètre d'ordre, *i.e.* $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta\, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$. Ce type de solution est celle envisagée par Fulde et Ferrell [2]. Les solutions des équations de Bogoliubov-de Gennes (2.16) sont aussi des ondes planes dont les vecteurs d'onde sont décalés par rapport à la solution homogène.

On a $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \bar{u}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}/2)\cdot\mathbf{r}}$ et $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \bar{v}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}/2)\cdot\mathbf{r}}$. Les $\bar{u}_{\mathbf{k}}$ et $\bar{v}_{\mathbf{k}}$ sont toujours donnés par les expressions (2.22) et les énergies propres par $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2} - \bar{\mu}\bar{q}\ \hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{q}}$ (voir la sous-section 1.3.2 ainsi que l'équation (1.26)).

Finalement, le calcul conduit au même hamiltonien h que dans le cas homogène si l'on remplace $\bar{\mu}$ par une différence de potentiel chimique effective :

$$\bar{\mu}_{\mathbf{k}} = \bar{\mu}(1 + \bar{q}\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{q}}). \tag{2.35}$$

Physiquement, cette différence effective est la demi-distance entre les deux surfaces de Fermi selon la direction angulaire du vecteur $\mathbf{k}$ lorsque la surface extérieure est translatée du vecteur $\mathbf{q}$ (voir figure 1.7).

De la même façon que dans le cas homogène, on peut calculer de nombreuses observables pour l'onde plane de Fulde et Ferrell. Il suffit pour cela de remplacer dans les expressions du cas homogène la différence de potentiel chimique $\bar{\mu}$ par $\bar{\mu}_{\mathbf{k}}$ l'expression obtenue devant être moyennée sur la surface de Fermi. En particulier, l'équation du gap (2.29) est donnée par :

$$\ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) = 2\pi T \sum_{n=0}^{+\infty} \int_{S_F} d\tilde{\Omega}\, \mathrm{Re}\left(\frac{1}{\sqrt{(\omega_n - i\bar{\mu}_{\mathbf{k}})^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{\omega_n}\right), \tag{2.36}$$

équation qui coïncide exactement avec l'équation d'instabilité FFLO (1.31) dans la limite $\Delta \to 0$. On peut aussi déterminer l'énergie libre non minimisée :

$$\Omega = \ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right)\Delta^2 + 2\pi T \sum_{n=0}^{+\infty} \int_{S_F} d\tilde{\Omega}\, \mathrm{Re}\left(\frac{\Delta^2}{\omega_n} - 2\sqrt{\Delta^2 + (\omega_n - i\bar{\mu}_{\mathbf{k}})^2} + 2\omega_n\right). \tag{2.37}$$

Calcul à température nulle

Partant de l'expression (2.37), on peut effectuer les intégrations fréquentielle et angulaire. On obtient pour $\bar{q} > 1$:

$$\begin{aligned}\frac{\Omega}{\bar{\mu}^2} =& -\delta^2 \ln\delta_0 - \frac{\delta^2}{2} + 1 + \frac{\bar{q}^2}{3} + \frac{\delta^2}{2\bar{q}}\mathrm{Re}\left\{q_+ \ln(|q_+| + \sqrt{q_+^2 - \delta^2})\right. \\ &\left. - \sqrt{q_+^2 - \delta^2} + (q_+ \to q_-)\right\} - \frac{1}{6\bar{q}}\mathrm{Re}\left\{(q_+^2 - \delta^2)^{3/2} + (q_+ \to q_-)\right\},\end{aligned} \tag{2.38}$$

où l'on a utilisé les notations $q_\pm = \bar{q} \pm 1$, $\delta = \Delta/\bar{\mu}$ et $\delta_0 = \Delta_0/\bar{\mu}$.

2.2.3 Formes plus complexes du paramètre d'ordre

L'étude des phases FFLO ne se réduit évidemment pas à l'état d'onde plane de Fulde-Ferrell. C'est pourtant le seul cas soluble analytiquement. Des formes plus complexes pour le paramètre d'ordre donnent des équations de Bogoliubov-de Gennes (2.16) dont la résolution ne peut être que numérique. C'est notamment déjà le cas pour la forme $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$ qui joue un rôle important au voisinage du point tricritique.

La résolution analytique de l'onde plane Fulde-Ferrell ne permet pas de conclure de façon générale sur le problème des phases FFLO. En particulier, nous verrons que l'onde plane n'est jamais l'état de plus basse énergie. L'instabilité FFLO que nous avons détaillée dans le chapitre 1, privilégie pour la forme du paramètre d'ordre des vecteurs d'onde formant une sphère dont le rayon dépend de la température. Une fois dans la phase condensée, ces vecteurs d'onde vont continuer à jouer un rôle prédominant tant qu'on ne s'éloigne pas trop de la transition. On a une bonne compréhension de la formation des paires de Cooper dans le cas où un seul vecteur d'onde $\mathbf{q}$ est présent dans la forme du paramètre d'ordre, comme c'est le cas pour l'onde plane de Fulde et Ferrell. Les formes plus complexes du paramètre d'ordre, où plusieurs vecteurs d'onde sont présents, sont beaucoup plus difficiles à traiter qualitativement et quantitativement.

Le cas de l'onde plane donne cependant la position exacte de la transition tant que celle-ci reste du second ordre. Dans ce cas, l'amplitude du paramètre d'ordre tend vers zéro au voisinage de la transition et les équations décrivant la phase condensée deviennent linéaires. Il y a alors découplage entre les différents vecteurs d'onde présents dans la forme du paramètre d'ordre. L'étude de la seule onde plane est par conséquent suffisante pour prédire la position de la transition.

La coïncidence entre les équations (1.3) et (2.36) confirme la cohérence entre la resommation diagrammatique des échelles du chapitre 1 qui détermine la position de la transition en venant de la phase normale et l'approche de ce chapitre où on vient de la phase condensée.

Les résultats de l'onde plane restent toutefois pertinent pour la compréhension de la phase condensée. C'est, on le répète, le seul cas où l'on peut calculer exactement l'énergie libre et l'équation du gap correspondante pour tout Δ et $\mathbf{q}$. Ceci va nous donner des indications sur le comportement global de l'énergie, notamment sur la présence de singularités. Nous verrons aussi que l'énergie d'une onde plane Fulde-Ferrell est un terme qui intervient toujours dans l'énergie libre même si d'autres termes, qu'on pourra interpréter formellement comme des couplages entre vecteurs d'onde, se rajoutent dans le cas de paramètres d'ordre plus complexes.

En conclusion, on peut dire que cette étude des cas exactement solubles n'est pas satisfaisante si l'on veut étudier la compétition entre les phases FFLO. Nous allons présenter dans la suite le formalisme des équations de Gorkov [8]. Celui-ci va nous permettre d'étudier précisément le voisinage de la transition, où les paramètres d'ordre sont petits, dans l'esprit de la théorie de Ginzburg-Landau.

2.3 Équations de Gorkov

2.3.1 Établissement des équations

On reste pour la dérivation des équations de Gorkov dans le cadre du traitement BCS d'Eilenberger de la phase condensée. Ces équations vont se révéler être plus pratiques à utiliser que les équations de Bogoliubov-de Gennes (2.16). Nous verrons notamment qu'il est simple de construire un développement de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre.

On définit les fonctions de Green suivantes :

$$\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) = \begin{pmatrix} -\langle T_\tau \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}',0)\rangle & 0 \\ 0 & -\langle T_\tau \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}',0)\rangle \end{pmatrix}, \tag{2.39}$$

$$\mathcal{F}^+(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) = \begin{pmatrix} 0 & -\langle T_\tau \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}',0)\rangle \\ \langle T_\tau \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}',0)\rangle & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.40}$$

les valeurs moyennes $\langle\cdots\rangle$ étant calculées avec l'opérateur densité effectif $\hat{\rho}_h$ défini dans l'équation (2.5). T_τ désigne le produit ordonné en temps. Les opérateurs champs sont propagés pendant le temps imaginaire τ selon [3] :

$$\hat{\psi}(\mathbf{r},\tau) = e^{h\tau}\hat{\psi}(\mathbf{r})e^{-h\tau}, \tag{2.41}$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},\tau) = e^{h\tau}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})e^{-h\tau}, \tag{2.42}$$

de sorte que les opérateurs d'évolution commutent avec l'opérateur densité $\hat{\rho}_h$. La fonction $\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)$ est la fonction de Green normale du système et elle est non nulle dans l'état normal. Ce n'est pas le cas de la fonction de Green anormale $\mathcal{F}^+(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)$. $\mathcal{F}^+(\mathbf{r},\mathbf{r}',0)$ s'interprète comme la fonction d'onde des paires de Cooper décrivant aussi bien l'état interne des paires que le mouvement de leur centre de masse.

Pour obtenir les équations de Gorkov, on détermine les équations du mouvement pour les champs atomiques $\hat{\psi}(\mathbf{r},\tau)$ et $\hat{\psi}(\mathbf{r},\tau)^\dagger$ à l'aide de l'hamiltonien effectif h (2.4). Le résultat est le système suivant :

$$\left(-\partial_\tau + \frac{\hbar^2\nabla^2_{\mathbf{r}}}{2m} + \epsilon_F - \bar{\mu}\sigma_z\right)\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) + \Delta(\mathbf{r})\sigma_x\mathcal{F}^+(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\tau), \tag{2.43a}$$

$$\left(\partial_\tau + \frac{\hbar^2\nabla^2_{\mathbf{r}}}{2m} + \epsilon_F - \bar{\mu}\sigma_z\right)\mathcal{F}^+(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) - \Delta^*(\mathbf{r})\sigma_x\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) = 0, \tag{2.43b}$$

où l'on a identifié le potentiel chimique μ à l'énergie de Fermi ϵ_F. σ_x et σ_z sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.44}$$

Ces équations se généralisent aux problèmes dynamiques si l'on prend un temps réel. Dans le cas d'un temps imaginaire τ, la périodicité en τ des fonctions de Green $\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)$ et $\mathcal{F}^+(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)$, de période β, permet de décomposer celles-ci sur les fréquences de Matsubara :

$$\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) = T\sum_{n\in\mathbf{Z}} e^{-i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n) \qquad \text{avec} \qquad \omega_n = \pi T(2n+1), \tag{2.45}$$

ce qui a simplement pour effet de remplacer ∂_τ par $-i\omega_n$, $\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)$ par $\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$, $\mathcal{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)$ par $\mathcal{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$ et $\delta(\tau)$ par 1 dans les équations de Gorkov (2.43).

[3] avec cette définition, $\hat{\psi}(\mathbf{r},\tau)$ et $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},\tau)$ ne sont pas hermitiques conjugués

L'équation du gap (2.14), quant à elle, peut se récrire à l'aide de la fonction de Green anormale :

$$\Delta^*(\mathbf{r}) = g\,\mathcal{F}^+_{1,2}(\mathbf{r},\mathbf{r},0^-) = g\,T\sum_{n\in\mathbf{Z}}\mathcal{F}^+_{1,2}(\mathbf{r},\mathbf{r},i\omega_n)e^{i\omega_n 0^+}. \tag{2.46}$$

Énergie libre

Nous allons voir que l'énergie libre peut en fait simplement s'écrire comme une fonction de $\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$. Pour l'obtenir de façon simple et claire, on peut commencer par développer les opérateurs champs $\hat{\psi}(\mathbf{r},\tau)$ et $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},\tau)$ selon les modes de Bogoliubov, (2.15). On obtient :

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{1,1}(\mathbf{r},\mathbf{r},\tau<0) &= \langle\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r},0)\hat{\psi}_\downarrow(\tau)\rangle = \\ &= \sum_s |v_s(\mathbf{r})|^2 e^{\tau(\epsilon_s-\bar{\mu})}\langle\hat{b}_{s,1}\hat{b}^\dagger_{s,1}\rangle + |u_s(\mathbf{r})|^2 e^{-\tau(\epsilon_s+\bar{\mu})}\langle\hat{b}^\dagger_{s,2}\hat{b}_{s,2}\rangle,\end{aligned} \tag{2.47}$$

et on peut dériver une formule similaire pour $\mathcal{G}_{2,2}(\mathbf{r},\mathbf{r},\tau<0)$. En utilisant la normalisation des fonctions u_s et v_s ainsi que les relations d'anticommutation (2.17), on obtient finalement :

$$\langle h\rangle = -\int_{\tau\to 0^-} d\mathbf{r}\,\partial_\tau\left[\mathcal{G}_{1,1}(\mathbf{r},\mathbf{r},\tau)+\mathcal{G}_{2,2}(\mathbf{r},\mathbf{r},\tau)\right] = -\int_{\tau\to 0^-} d\mathbf{r}\,\partial_\tau \mathrm{Tr}\,\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r},\tau). \tag{2.48}$$

La suite du calcul est astucieuse [68], elle consiste à récrire l'énergie libre F_h sous la forme d'une intégrale :

$$F_h = -T\ln\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta h}\right) = T\int_T^{+\infty}\frac{dt}{t^2}\,\frac{\mathrm{Tr}\left[he^{-h/t}\right]}{\mathrm{Tr}\left[e^{-h/t}\right]} \tag{2.49}$$

sur la variable t. Le terme apparaissant dans l'intégrale $\mathrm{Tr}\left[he^{-h/t}\right]/\mathrm{Tr}\left[e^{-h/t}\right]$ peut se calculer formellement comme la valeur moyenne de h à la température effective t. On reprend donc les calculs précédents en remplaçant la température T par t, les valeurs moyennes étant prises avec l'opérateur densité $e^{-h/t}$. Partant de l'expression (2.49), on remplace $\langle h\rangle$ (prise à la température effective t) par son expression (2.48) et $\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r},\tau)$ par son développement (2.45) sur les fréquences de Matsubara effectives $\omega_n = \pi t(2n+1)$. Le calcul conduit, après le changement de variable $\omega = \pi t(2n+1)$, à la relation suivante :

$$F_h = \int d\mathbf{r}\left[iT\sum_{n\geq 0}\int_{\omega_n}^{+\infty} d\omega\,\mathrm{Tr}\,\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r},i\omega) + c.c.\right], \tag{2.50}$$

où les $\omega_n = \pi T(2n+1)$ sont les fréquences de Matsubara à la température T.

La résolution des équations de Gorkov et la détermination des fonctions de Green $\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$ et $\mathcal{F}^+(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$ donnent donc accès directement à toutes les propriétés thermodynamiques du système. Le problème est que l'on ne sait toujours pas résoudre ces équations pour des paramètres d'ordre autres que l'onde plane de Fulde-Ferrell. Cependant, les équations de Gorkov se prêtent bien au développement de l'équation du gap en fonction du paramètre d'ordre. Auparavant, nous allons récrire ces équations sous forme intégrale car cela permet d'effectuer de façon commode ce développement.

2.3.2 Forme intégrale

La fonction de Green $\mathcal{G}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$ est définie comme l'inverse de l'opérateur apparaissant dans les équations de Gorkov (2.43), c'est-à-dire :

$$\left(i\omega_n + \frac{\hbar^2\nabla^2_{\mathbf{r}}}{2m} + \epsilon_F - \bar{\mu}\sigma_z\right)\mathcal{G}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{2.51}$$

La fonction de Green normale $\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$ se réduit à $\mathcal{G}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$ dans l'état normal, c'est-à-dire pour $\Delta = 0$. $\mathcal{G}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$ est en fait le propagateur d'un fermion libre, nous l'avons déjà rencontré dans l'**encadré** 1. Les invariances par translation et par rotation impliquent que $\mathcal{G}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',i\omega_n)$ ne dépend que de $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$. Sa décomposition sur les ondes planes, donnée par

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}',i\omega_n) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}\,\mathcal{G}_0(\mathbf{k},i\omega_n)e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}, \tag{2.52}$$

diagonalise l'opérateur $\nabla^2_{\mathbf{r}}$ si bien que $\mathcal{G}_0(\mathbf{k},i\omega_n) = (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - \bar{\mu}\sigma_z)^{-1}$.

On peut maintenant multiplier les équations de Gorkov (2.43) par $\mathcal{G}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}_1,i\omega_n)$ et intégrer sur $\mathbf{r}$. On obtient après intégration par partie et en changeant les indices le système suivant :

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,i\omega_n) = \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2,i\omega_n) - \int d\mathbf{r}\,\mathcal{G}_0(\mathbf{r}_1-\mathbf{r},i\omega_n)\Delta(\mathbf{r})\sigma_x\mathcal{F}^+(\mathbf{r},\mathbf{r}_2,i\omega_n), \tag{2.53a}$$

$$\mathcal{F}^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,i\omega_n) = \int d\mathbf{r}\,\mathcal{G}_0(\mathbf{r}_1-\mathbf{r},-i\omega_n)\Delta^*(\mathbf{r})\sigma_x\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}_2,i\omega_n). \tag{2.53b}$$

Cette forme des équations est propice à un développement de l'équation du gap (2.36). Δ^* s'exprime en fonction d'un des coefficient de la matrice $\mathcal{F}^+$. Or $\mathcal{F}^+$ dépend de la fonction de Green $\mathcal{G}$ qui dépend elle-même de $\mathcal{F}^+$. On peut donc utiliser le développement formel suivant :

$$\mathcal{F}^+ = \mathcal{G}_0\Delta^*\mathcal{G} = \mathcal{G}_0\Delta^*\mathcal{G}_0 - \mathcal{G}_0\Delta^*\mathcal{G}_0\Delta\mathcal{F}^+ = \mathcal{G}_0\Delta^*\mathcal{G}_0 - \mathcal{G}_0\Delta^*\mathcal{G}_0\Delta\mathcal{G}_0\Delta^*\mathcal{G} = \cdots \tag{2.54}$$

On stoppe le développement en remplaçant le dernier $\mathcal{G}$ par $\mathcal{G}_0$ et on obtient ainsi une équation sur Δ qui ne dépend que de $\mathcal{G}_0$ (dont on connaît l'expression).

Une écriture plus commode des équations intégrales de Gorkov (2.53) consiste à n'en conserver que deux sur les quatre. Cela donne :

$$G_\uparrow(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = G(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) - \int d\mathbf{r}\,G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})\Delta(\mathbf{r})F^+(\mathbf{r},\mathbf{r}_2), \tag{2.55a}$$

$$F^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \int d\mathbf{r}\,\bar{G}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})\Delta^*(\mathbf{r})G_\uparrow(\mathbf{r},\mathbf{r}_2), \tag{2.55b}$$

où l'on a utilisé les notations allégées suivantes : $G_\uparrow(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \mathcal{G}_{2,2}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,i\omega_n)$, $G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}) = \mathcal{G}_{0_{2,2}}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,i\omega_n)$, $\bar{G}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}) = \mathcal{G}_{0_{1,1}}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,-i\omega_n)$ et $F^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \mathcal{F}^+_{1,2}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,i\omega_n)$. En particulier, l'équation du gap se récrit :

$$\Delta^*(\mathbf{r}) = g\,T\sum_{n\in\mathbf{Z}} F^+(\mathbf{r},\mathbf{r})\;e^{i\omega_n 0^+}, \tag{2.56}$$

où la dépendance de F^+ en fonction de $i\omega_n$ est implicite.

2.4 Énergie de Ginzburg-Landau généralisée

2.4.1 Développement de l'équation du gap

On utilise donc l'idée du développement (2.54) appliquée aux équations (2.55) et (2.56) et on passe dans l'espace de Fourier avec $\Delta_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r}\Delta(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$. On obtient après transformations de Fourier le développement suivant

$$\frac{\Delta_{\mathbf{q}}^*}{\lambda} = J_2(|\mathbf{q}|)\Delta_{\mathbf{q}}^* - \sum_{\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=\mathbf{q}} J_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q})\Delta_{\mathbf{q}_1}^*\Delta_{\mathbf{q}_2}\Delta_{\mathbf{q}_3}^* + \mathcal{O}(\Delta^5) \tag{2.57}$$

avec

$$J_2(|\mathbf{q}|) = \frac{T}{N_0}\sum_{n,\mathbf{k}} \bar{G}(\mathbf{k})G(\mathbf{q}-\mathbf{k}), \tag{2.58}$$

$$J_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q}) = \frac{T}{N_0}\sum_{n,\mathbf{k}} \bar{G}(\mathbf{k})G(\mathbf{q}_1-\mathbf{k})\bar{G}(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)G(\mathbf{q}-\mathbf{k}). \tag{2.59}$$

Chacun des termes du développement, *i.e.* J_2 et J_4, dépend implicitement de la température et de la différence de potentiel chimique $\bar{\mu}$. A l'ordre le plus bas en Δ, c'est-à-dire lorsque $\Delta \to 0$, on trouve $J_2(|\mathbf{q}|) = 1/\lambda$, c'est-à-dire exactement l'équation d'instabilité FFLO (1.20). Nous avions par ailleurs déjà obtenu ce résultat pour l'état homogène et pour l'onde plane de Fulde-Ferrell. On voit qu'à cet ordre, les différents vecteurs d'onde intervenant dans le paramètre d'ordre ne sont pas couplés. Le couplage apparaît dès lors que l'on considère le terme d'ordre 3 en Δ ce qui se voît explicitement dans l'expression de $J_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q})$.

Les termes d'ordres plus élevés comme 5, 7, où 9, peuvent aussi être exprimés analytiquement. On obtient à chaque fois un produit de fonctions de Green, respectivement 3, 4 et 5 fois G (et $\bar{G}$). La sommation se fait sur 5, 7 et 9 vecteurs d'onde avec toujours la conservation des moments $\sum_{i=1}^{5,7,9}\mathbf{q}_i(-1)^{i+1} = \mathbf{q}$.

On peut déterminer l'énergie libre en intégrant par rapport à $\Delta_{\mathbf{q}}$ l'équation (2.57), ce qui donne :

$$\begin{aligned}\Omega = \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{1}{\lambda} - J_2(|\mathbf{q}|)\right] |\Delta_{\mathbf{q}}|^2 \\ + \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=\mathbf{q}_4} J_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q}_4)\Delta_{\mathbf{q}_1}^*\Delta_{\mathbf{q}_2}\Delta_{\mathbf{q}_3}^*\Delta_{\mathbf{q}_4} + \mathcal{O}(\Delta^6).\end{aligned} \tag{2.60}$$

Un terme trivial apparaissant à tous les ordres est celui où tous les vecteurs $\mathbf{q}_i$ sont égaux. Ces termes sont les seuls présents pour l'état de Fulde-Ferrell si bien qu'il est possible de les resommer. On note $\mathbf{q}_0$ ce vecteur commun et Ω_0 la contribution à l'énergie correspondant à ces termes :

$$\Omega_0 = \left[\frac{1}{\lambda} - J_2(|\mathbf{q}_0|)\right] |\Delta_{\mathbf{q}_0}|^2 + \frac{J_4(\{\mathbf{q}_0\}_{\times 4})}{2}|\Delta_{\mathbf{q}_0}|^4 + \frac{J_6(\{\mathbf{q}_0\}_{\times 6})}{3}|\Delta_{\mathbf{q}_0}|^6 + \cdots \tag{2.61}$$

La resommation conduit à l'expression (2.37) si l'on utilise la substitution $1/\lambda = \ln(T/T_c^0) + 2\pi T\sum_{n\geq 0} 1/\omega_n$ (voir l'équation (2.26)). L'énergie d'une onde plane de Fulde-Ferrell contribue donc toujours à l'énergie totale.

2.4.2 Etude au voisinage d'une transition du second ordre

Au voisinage d'une transition du deuxième ordre, le paramètre d'ordre tend vers zéro. Il est alors légitime de ne garder dans l'énergie que les termes d'ordre le plus bas dans l'amplitude du paramètre d'ordre, c'est-à-dire les ordres 2 et 4 en Δ. L'annulation du terme d'ordre 2, correspondant à l'équation $J_2(|\mathbf{q}|) = 1/\lambda$, c'est-à-dire à l'équation d'instabilité FFLO (1.20), donne la position de la transition en fonction de $|\mathbf{q}|$. Sa minimisation par rapport à $|\mathbf{q}|$ donne la valeur optimale pour la norme des vecteurs d'onde $|\mathbf{q}| = q_o$. Les différents vecteurs d'onde du paramètre d'ordre sont alors situés sur la sphère de rayon q_o et les structures correspondantes sont dégénérées si l'on en reste à cet ordre du développement de l'énergie.

L'ordre 4 en Δ est inclus perturbativement afin d'étudier le couplage des vecteurs d'onde et lever ainsi la dégénérescence entre les différentes structures possibles du paramètre d'ordre. Cette étude perturbative du terme du 4$^{\text{e}}$ ordre a été introduite par Larkin et Ovchinnikov [3] et reprise par Shimahara [71] dans le cas 2D. Le principe de cette approche est assez semblable à la théorie de Ginzburg-Landau, même si l'on ne se restreint pas, comme dans celle-ci, à des faibles variations spatiales du paramètre d'ordre à l'échelle de ξ_0.

A 2D, le développement en Δ est non analytique pour $T = 0$. Cette singularité donne un comportement particulier sur lequel nous reviendrons dans la section 3.2. Avant de donner une nouvelle expression pour l'énergie, nous allons utiliser une simplification introduite par Larkin et Ovchinnikov [3]. Celle-ci consiste à se restreindre à des vecteurs coplanaires dans la somme à quatre vecteurs d'onde du terme d'ordre 4 en Δ. C'est évidemment le cas à deux dimensions puisque tous les vecteurs sont dans le même plan. Ce n'est pas forcément le cas à 3D. Si l'on prend comme exemple l'ensemble des vecteurs qui pointent vers les sommets d'un cube, la somme des vecteurs $(-1,-1,1)$ et $(-1,1,-1)$ est égale à la somme des vecteurs $(-1,1,1)$ et $(-1,-1,-1)$ alors que ces quatre vecteurs ne sont pas dans le même plan.

Par conséquent, comme les vecteurs ont la même norme, on n'a que trois choix possibles pour satisfaire la conservation des moments $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_4$, à savoir :

- $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2$ et $\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_4$
- $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_4$ et $\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_2$
- $\mathbf{q}_1 = -\mathbf{q}_3$ et $\mathbf{q}_2 = -\mathbf{q}_4$

Cette simplification conduit à l'expression suivante pour le terme d'ordre 4 en Δ dans l'énergie (2.60) :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\sum_{i,j}(2-\delta_{\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j})|\Delta_{\mathbf{q}_i}|^2|\Delta_{\mathbf{q}_j}|^2 J(\alpha_{\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j}) \\ +(1-\delta_{\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j}-\delta_{\mathbf{q}_i,-\mathbf{q}_j})\Delta_{\mathbf{q}_i}\Delta_{-\mathbf{q}_i}\Delta^*_{\mathbf{q}_j}\Delta^*_{-\mathbf{q}_j}\tilde{J}(\alpha_{\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j})\end{aligned} \tag{2.62}$$

où $\alpha_{\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j}$ est l'angle entre $\mathbf{q}_i$ et $\mathbf{q}_j$. Le paramètre d'ordre a la forme suivante : $\Delta(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}_j}\Delta_{\mathbf{q}_j}e^{i\mathbf{q}_j\cdot\mathbf{r}}$ avec $|\mathbf{q}_j| = q_o$ où q_o est fixé par la minimisation du terme d'ordre 2 en Δ.

Le problème est donc restreint à la connaissance des fonctions $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$

définies par :

$$N_0 J(\alpha_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2}) = T \sum_{n,k} \bar{G}(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1)\bar{G}(\mathbf{k}+\mathbf{q}_2)G^2(\mathbf{k}), \tag{2.63}$$

$$N_0 \tilde{J}(\alpha_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2}) = T \sum_{n,k} \bar{G}(\mathbf{k})\bar{G}(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)G(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1)G(\mathbf{k}+\mathbf{q}_2). \tag{2.64}$$

Par exemple, pour $\Delta(\mathbf{r}) = 2\Delta_1 \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$, l'énergie libre variationnelle est $\Omega = 2[1/\lambda - J_2(q_o)]\Delta_1^2 + [J(0)+2J(\pi)]\Delta_1^4$. Sa minimisation donne $\Omega_{\min} = -[1/\lambda - J_2(q_o)]^2/(J(0)+2J(\pi))$.

$T = 0$ à trois dimensions

Larkin et Ovchinnikov [3] ont calculé le terme d'ordre 4 en Δ pour quelques formes cristallines à température nulle et à trois dimensions. Cette étude a depuis été largement complétée par d'autres structures cristallines, toujours à température nulle [72]. Les figures 2.3 représentent les fonctions $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$ à température nulle. Une des conclusions de ces études est que pour de nombreuses structures cristallines le terme d'ordre 4 en Δ peut être négatif ainsi que le terme d'ordre 6 en Δ, ce qui indique que la transition vers ces structures cristallines est en fait du premier ordre. On sort du domaine de validité d'une analyse à la Ginzburg-Landau où l'amplitude du paramètre d'ordre est supposée être petite ce qui n'est pas le cas en général pour une transition du premier ordre.

En conclusion la transition vers les phases FFLO est du premier ordre à trois dimensions au moins à basse température. Par ailleurs, on sait que la transition vers la phase BCS est du second ordre pour $\bar{\mu} = 0$. Il est donc vraisemblable que la transition du premier ordre apparaît au voisinage du point tricritique ($\bar{\mu}_c$,T_c) (voir figures 1.4 et 2.1), c'est-à-dire au point où apparaissent les phases FFLO. Dans ce domaine, nous allons voir qu'il est possible d'écrire un développement contrôlé de l'énergie libre permettant de décrire l'ordre de la transition ainsi que la compétition entre les différentes formes du paramètre d'ordre.

2.4.3 Équation de Ginzburg-Landau généralisée

Dans le voisinage du point tricritique, deux conditions propices à un développement de l'énergie sont réunies :

- La transition du premier ordre de Clogston-Chandrasekhar apparaît juste sous le point tricritique. Ainsi, elle reste faiblement du premier ordre au voisinage du point tricritique, c'est-à-dire que le paramètre d'ordre Δ reste petit et qu'un développement de l'énergie à l'ordre six en puissances de Δ est suffisant pour décrire la transition. Ceci va vraisemblablement rester vrai dans le cas où le paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$ n'est pas homogène.
- Le vecteur d'onde correspondant à l'instabilité FFLO (voir figure 1.5) est continu au voisinage du point tricritique. On en déduit que les variations spatiales du paramètre d'ordre dans le voisinage du point tricritique sont petites à l'échelle de ξ_0 ce qui justifie un développement en puissances de $\mathbf{q}$ de l'énergie.

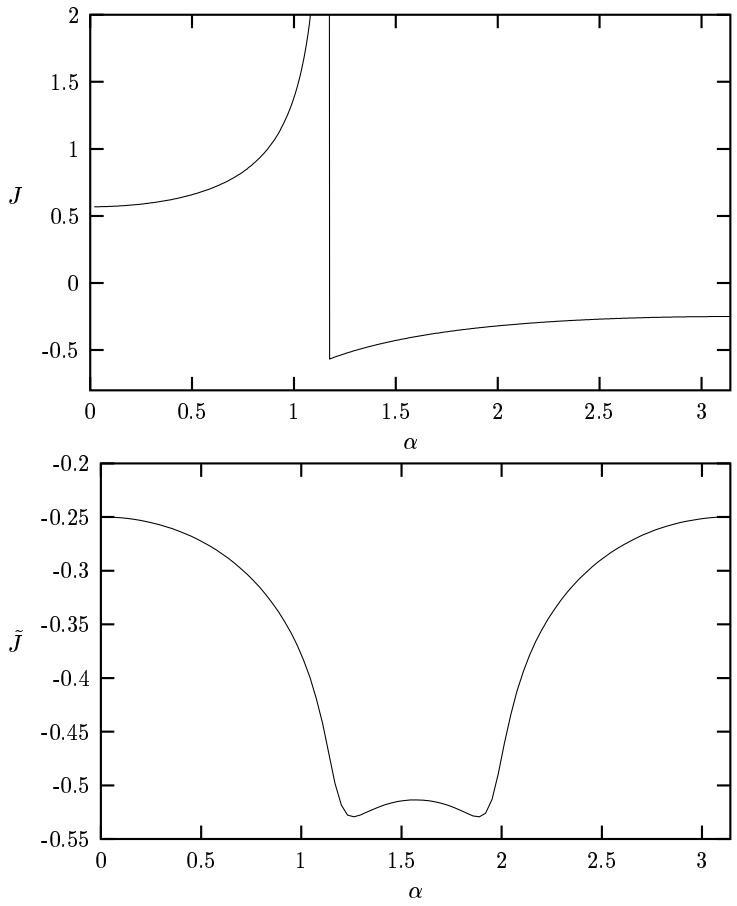


FIG. 2.3: Fonctions $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$ à $T = 0$ à 3 D. α est l'angle entre les deux vecteurs d'onde intervenant dans la définition (2.63) de J et $\tilde{J}$. La norme des vecteurs d'onde est donnée par $\bar{q} = 1.1997$, voir figure 1.5. $J(\alpha)$ diverge pour $\alpha_0 = \arccos(1/\bar{q})$.

Finalement, quand on se place au voisinage du point tricritique, la proximité de la transition BCS classique, qui est du second ordre et pour laquelle le paramètre d'ordre est homogène, justifie que nous développions l'énergie libre variationnelle Ω en fonction à la fois du paramètre d'ordre et du gradient du paramètre d'ordre. Dans les deux cas, les invariances $\Delta \to -\Delta$ et $\mathbf{q} \to -\mathbf{q}$ imposent que seuls les termes d'ordre pair sont non nuls. Pour le développement dans le paramètre d'ordre, on sait déjà (voir la sous-section 2.2.1) que les termes d'ordre 2 et 4 sont nuls au point tricritique pour une phase homogène. Ceci implique la nécessité d'effectuer un développement jusqu'à l'ordre 6. Le développement dans le gradient doit se faire au moins à l'ordre 4 si l'on veut minimiser l'énergie par rapport à la norme du vecteur d'onde. Nous verrons que cela est en fait suffisant.

Le calcul du développement est détaillé dans l'annexe A. Il conduit au résultat suivant :

$$\begin{aligned}\Omega = \sum_{\mathbf{q}} \left(a_0 - \frac{a_2}{3}\bar{q}^2 + \frac{a_4}{5}\bar{q}^4\right) |\Delta_{\mathbf{q}}|^2 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}_i} \Delta_{\mathbf{q}_1}\Delta^*_{\mathbf{q}_2}\Delta_{\mathbf{q}_3}\Delta^*_{\mathbf{q}_4} \times \\ \times \left[\frac{a_2}{2} - \frac{a_4}{6}(\bar{q}_1^2 + \bar{q}_2^2 + \bar{q}_3^2 + \bar{q}_4^2 + \bar{\mathbf{q}}_1.\bar{\mathbf{q}}_3 + \bar{\mathbf{q}}_2.\bar{\mathbf{q}}_4)\right] \\ + \frac{a_4}{8}\sum_{\mathbf{q}_i} \Delta_{\mathbf{q}_1}\Delta^*_{\mathbf{q}_2}\Delta_{\mathbf{q}_3}\Delta^*_{\mathbf{q}_4}\Delta_{\mathbf{q}_5}\Delta^*_{\mathbf{q}_6},\end{aligned} \tag{2.65}$$

où la conservation des moments est implicite pour le terme du quatrième ordre $\bar{\mathbf{q}}_1+\bar{\mathbf{q}}_3 = \bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4$ et pour le terme du sixième ordre $\bar{\mathbf{q}}_1+\bar{\mathbf{q}}_3+\bar{\mathbf{q}}_5 = \bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4+\bar{\mathbf{q}}_6$. On a utilisé les vecteurs d'onde adimensionnés $\bar{\mathbf{q}}_j = \hbar v_F\, \mathbf{q}_j/2\bar{\mu}$, $\Delta_{\mathbf{q}}$ est en unité de $\bar{\mu}$ et Ω en unité de $\bar{\mu}^2$. Ce résultat est valable à trois dimensions. A deux dimensions, l'intégration angulaire est différente : il faut multiplier les termes en $\bar{q}^2$ par $3/2$ et les termes en $\bar{q}^4$ par $15/8$.

Exactement au point tricritique, on a $a_0 = 0$, $a_2 = 0$ (voir la sous-section 1.3.3) et $a_4 = 0.114$ donc l'énergie Ω est minimum pour $\Delta = 0$ et $\bar{q} = 0$ ce qui correspond à une transition du second ordre avec un paramètre d'ordre homogène. Le voisinage infiniment proche du point tricritique est donc décrit de façon exacte par le développement (2.65) de l'énergie libre puisque Δ et $\bar{q}$ y prennent des valeurs infinitésimales. Il est en particulier justifié de négliger dans le développement de l'énergie libre les termes d'ordres supérieurs à ceux présents dans (2.65).

Une fois que l'on s'est restreint au voisinage du point tricritique, une manière plus commode d'étudier le problème consiste à redimensionner les différentes grandeurs physiques de façon à faire disparaître les termes qui tendent vers zéro. On pose $\bar{\mathbf{q}} = (a_2/a_4)^{1/2}\tilde{\mathbf{q}}$, $a_0 = A_0 a_2^2/a_4$, $\Delta_{\mathbf{q}} = (a_2/a_4)^{1/2}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}}$ et $\Omega = (a_2^3/a_4^2)\tilde{F}$ et l'énergie libre se récrit sous la forme :

$$\begin{aligned}\tilde{F} = \sum_{\mathbf{q}} \left(A_0 - \frac{1}{3}\tilde{q}^2 + \frac{1}{5}\tilde{q}^4\right) |\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}}|^2 - \sum_{\mathbf{q}_i} \tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_1}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_3}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4} \times \\ \times \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{12}(\tilde{q}_1^2 + \tilde{q}_2^2 + \tilde{q}_3^2 + \tilde{q}_4^2 + \tilde{\mathbf{q}}_1.\tilde{\mathbf{q}}_3 + \tilde{\mathbf{q}}_2.\tilde{\mathbf{q}}_4)\right] \\ + \frac{1}{8}\sum_{\mathbf{q}_i} \tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_1}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_3}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_5}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_6},\end{aligned} \tag{2.66}$$

d'où a_2 et a_4 ont disparu. Cette expression redimensionnée est beaucoup plus commode. La minimisation de l'énergie libre ne dépend plus que du paramètre A_0 qui décrit la position du système dans le plan ($\bar{\mu}$,T). Le couplage entre les différents vecteurs d'onde reste apparent dans le terme du quatrième ordre.

Finalement, on a obtenu, à deux et à trois dimensions, une énergie libre effective au voisinage du point tricritique à l'expression analytique relativement simple. Son l'étude générale - dont sa minimisation qui donne la forme la plus stable - va nous permettre de bien comprendre la compétition entre les différentes phases FFLO au voisinage du point tricritique. On obtient aussi des indications

sur le comportement du système dans des situations plus complexes. Notons pour conclure qu'on peut encore transformer (2.66) afin d'obtenir l'énergie comme une fonction de $\Delta(\mathbf{r})$. On obtient après intégrations par partie :

$$\begin{aligned}\tilde{F} = \int d\mathbf{r} \left(A_0 |\tilde{\Delta}|^2 - \frac{1}{3}|\nabla\tilde{\Delta}|^2 + \frac{1}{5}|\nabla^2\tilde{\Delta}|^2 \right) - \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{4}|\tilde{\Delta}|^4 \right. \\ \left. - \frac{1}{24}\left(2(\nabla|\tilde{\Delta}|^2)^2 + 3(\nabla\tilde{\Delta}^2)(\nabla\tilde{\Delta}^{*2}) \right) \right] + \frac{1}{8}\int d\mathbf{r}|\tilde{\Delta}|^6.\end{aligned} \tag{2.67}$$

L'idée d'un développement de l'équation du gap au voisinage du point tricritique est initialement due à Malaspinas et Rice [73]. Les deux auteurs étudient dans leur article le problème du ferromagnétisme itinérant avec un modèle mathématiquement équivalent à celui de cette thèse. Nakanishi et Maki [74] reprennent le calcul et poussent le développement à l'ordre 6. Revenant à l'étude de l'apparition des phases FFLO, Buzdin et Kulic [75] font le lien entre ces travaux et une approche à la Ginzburg-Landau et établissent une équation pour l'énergie [76] de la forme de celle (2.67) que nous avons dérivée. Cette équation est reprise pour étudier le voisinage du point tricritique [77]. Récemment, l'effet des impuretés a été ajouté au formalisme [78].

2.5 Conclusions

Nous avons présenté dans ce chapitre la formulation d'Eilenberger [68] de la théorie BCS. Celle-ci consiste à décrire la condensation BCS du gaz d'électrons à l'aide d'un opérateur densité effectif dont la forme conduit à des valeurs moyennes anormales non nulles, du type $\langle\hat{\psi}_\downarrow\hat{\psi}_\uparrow\rangle$. Ces contractions anormales du champ sont caractéristiques de la présence d'un condensat de paires de Cooper. Comme dans une approche de champ moyen de type Weiss, l'opérateur densité effectif dépend d'un champ moléculaire $\Delta(\mathbf{r})$ déterminé par la minimisation de l'énergie libre. $\Delta(\mathbf{r})$ est le paramètre d'ordre de la transition, égal à zéro dans la phase normale.

Après quelques rappels sur la théorie de Landau des liquides de Fermi et sur le formalisme d'Eilenberger, nous avons montré comment inclure la description de la condensation BCS et les effets des liquides de Fermi dans un formalisme commun qu'on peut voir comme une extension du formalisme d'Eilenberger. Le formalisme obtenu permet de traiter analytiquement et complètement le cas d'un paramètre d'ordre homogène, comme c'est le cas pour la phase BCS classique, ainsi que le cas de l'onde plane de Fulde-Ferrell, mais ne permet pas l'étude complète d'un paramètre d'ordre inhomogène dont la forme est plus générale.

Il est néanmoins possible avec ce formalisme d'étudier le voisinage de la transition de phase entre l'état normal et l'état condensé inhomogène (ou autrement dit les phases FFLO) tant que le paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$ reste faible en amplitude. Pour cela, nous avons montré comment dériver les équations de Gorkov à partir du formalisme d'Eilenberger puis comment utiliser ces équations pour écrire un développement de l'énergie libre dans l'esprit d'une approche à la Ginzburg-Landau. Nous avons obtenu deux développements pouvant s'appliquer à deux situations physiques différentes.

Le premier développement est donné par (2.60). Il permet d'étudier la compétition entre les différentes structures du paramètre d'ordre au voisinage de la transition avec l'état normal étant supposé que celle-ci est du second ordre.

Le second développement est donné par (2.67). Son domaine de validité est restreint au voisinage du point tricritique (voir figures 1.4 et 2.1) où l'amplitude du paramètre d'ordre ainsi que ses variations spatiales sont faibles. Toutefois, ce développement de l'énergie libre s'applique aussi bien à la description d'une transition du second ordre qu'à une transition du premier ordre.

Ces deux développement vont donner lieu, dans le chapitre 3, à deux applications, à 2D et 3D.

Chapitre 3

Transition vers les phases FFLO, résultats analytiques

Nous présentons maintenant les résultats originaux de cette thèse. Les chapitres 1 et 2 ont été l'occasion de dresser les cadres expérimentaux et théoriques de cette partie de la thèse ainsi que de redériver les équations qui vont nous servir par la suite. En particulier, nous avons obtenu dans le chapitre 2 deux développements de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre que nous allons appliquer dans deux situations différentes.

La première situation est le voisinage du point tricritique où on peut décrire la compétition entre phases avec l'énergie (2.67). Nous allons regarder dans la première section de ce chapitre la ligne de transition entre l'état normal et la phase condensée. Nous obtenons en particulier l'ordre de la transition ainsi que la forme la plus stable du paramètre d'ordre.

La seconde situation est le voisinage de la ligne de transition entre l'état normal et la phase condensée à 2D et à toute température. Nous allons étudier dans la seconde section de ce chapitre la compétition entre les différentes phases inhomogènes à l'aide du développement (2.60) et dans une approche à la Ginzburg-Landau. Ce type d'approche est justifié tant que la transition est du second ordre ce que nous vérifierons *a posteriori*.

La troisième section de ce chapitre est plus phénoménologique. On retrouve le mécanisme de cascade obtenu dans la seconde section avec des arguments plus simples. L'étude de la transition à toute température et à 3D entre l'état normal et les phases FFLO est laissée au chapitre 4 car cette transition est du premier ordre et nous n'avons pas de solution analytique.

3.1 Voisinage du point tricritique

Avant de s'intéresser aux plus basses températures ou de considérer des situations plus complexes, il est instructif d'étudier en détail le voisinage du point tricritique. On a dérivé dans le chapitre précédent une expression pour l'énergie libre qui décrit exactement le système dans ce domaine limite, ce que nous ne pouvons pas faire à toute température. Nous allons utiliser cette expression pour

montrer deux résultats : tout d'abord que la transition est du premier ordre à 3D et du second ordre à 2D, puis que la phase énergétiquement la plus favorable est une forme unidimensionnelle plane de la forme $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$ à 2D et proche d'un cosinus à 3D. Une étude analytique précise du voisinage du point tricritique nous permet de dégager les mécanismes physiques qui interviennent dans la sélection des phases de plus basse énergie de sorte que l'on peut ensuite envisager la généralisation de ces idées à des situations physiques plus complexes.

Cette section s'organise de la façon suivante : on commence par rappeler la forme des cas simples du chapitre 2 au voisinage du point tricritique, puis on se restreint à un sous-espace particulier de paramètres d'ordre pour lequel on exhibe la structure de plus basse énergie $\Delta(\mathbf{r}) \sim \cos\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}$. On montre ensuite qu'au-delà de ce sous-espace particulier la structure du paramètre d'ordre de plus basse énergie est peu modifiée par rapport à la forme purement sinusoïdale. On conclut en expliquant pourquoi un développement en $\Delta(\mathbf{r})$ de l'énergie libre n'est pas envisageable à plus basse température et à 3D.

3.1.1 Cas simples

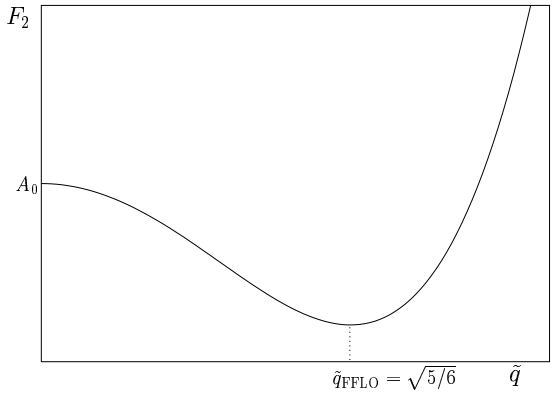


FIG. 3.1: Coefficient d'ordre le plus bas de l'énergie F_2 en fonction du vecteur d'onde $\tilde{q}$.

Avant d'étudier le problème général de la minimisation de l'énergie libre (2.67), on rappelle ce que donnent les cas simples en lien avec ce qu'on a vu dans les chapitres précédents.

Tout d'abord, si on considère le cas homogène où le paramètre d'ordre ne varie pas spatialement, l'énergie libre est simplement donnée par $\tilde{F} = A_0\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\Delta}^4/4 + \tilde{\Delta}^6/8$. L'annulation du terme d'ordre le plus bas, $A_0 = 0$, correspond à $a_0 = 0$ donc à la ligne spinodale. La transition du premier ordre de Clogston-Chandrasekhar est quant à elle donnée par $A_0 = 1/8$ et $\tilde{\Delta} = 1$. Au-delà de cette valeur critique de A_0 , l'énergie est toujours positive et l'état normal est favorisé.

On suppose maintenant que la transition est du second ordre mais que le paramètre d'ordre peut varier spatialement. On ne garde alors que le terme d'ordre le plus bas dont l'annulation donne la position de la transition $\tilde{F} = F_2\tilde{\Delta}^2$ avec $F_2 = A_0 - \tilde{q}^2/3 + \tilde{q}^4/5$. F_2 est représenté figure 3.1. Le fond de la cuvette correspond

au minimum d'énergie donc à l'état le plus stable. Il est donné par $\tilde{q}^2_{\mathrm{FFLO}} = 5/6$ indépendamment de A_0. Un changement de A_0 implique une translation globale de la courbe représentée figure 3.1 suivant l'axe des ordonnées. La transition est atteinte lorsque le minimum d'énergie est égal à zéro, c'est-à-dire pour $A_0 = 5/36$.

Ces trois valeurs particulières de A_0 sont représentées figure 3.2. On voit notamment que l'instabilité FFLO à 3D est située au-delà de la limite de Clogston-Chandrasekhar même si l'écart est très faible ($\delta A_0 = 1.39 \times 10^{-2}$). A 2D, seule la ligne d'instabilité FFLO est différente et $F_2 = A_0 - \tilde{q}^2/2 + 3\tilde{q}^4/8$. On en déduit que $\tilde{q}^2_{\mathrm{FFLO}} = 2/3$ et $A_0 = 1/6$ à la transition. L'écart est alors plus marqué avec la limite de Clogston-Chandrasekhar ($\delta A_0 = 4.17 \times 10^{-2}$).

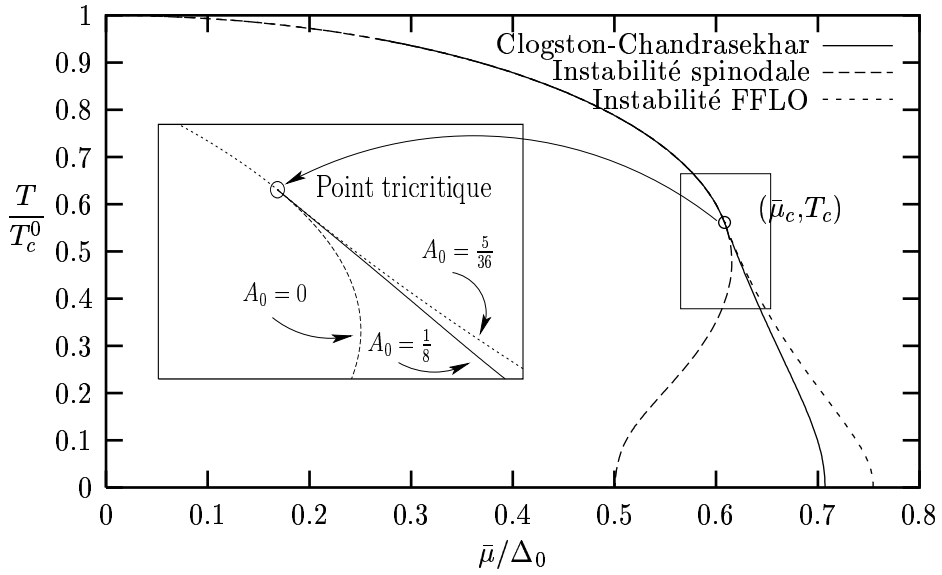


FIG. 3.2: Agrandissement au voisinage du point tricritique $(\bar{\mu}_c, T_c)$. La ligne d'instabilité FFLO est calculée à 3D.

3.1.2 Sous-espace LO

Lorsque la transition est du second ordre et que le paramètre d'ordre est infiniment proche de zéro, il est légitime de fixer la norme du vecteur d'onde à la valeur donnée par l'instabilité FFLO, la direction étant dégénérée (voir la sous-section 2.4.2 et [3]). On se restreint alors à un sous-espace pour le paramètre d'ordre de la forme :

$$\tilde{\Delta}(\mathbf{r}) = \sum_{\tilde{\mathbf{q}}_j} \tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_j} e^{i\tilde{\mathbf{q}}_j \cdot \mathbf{r}} \qquad \text{avec} \qquad |\tilde{\mathbf{q}}_j| = q_0. \tag{3.1}$$

On appelle ce sous-espace le sous-espace LO.

Cependant, à 3D, on s'attend à ce que la transition soit du premier ordre et que le paramètre d'ordre ne soit pas infinitésimal. Dans ce cas, les non linéarités de l'équation du gap introduisent des harmoniques dans le spectre en vecteur d'onde

du paramètre d'ordre à la transition. Le problème correspondant est difficile à résoudre directement.

C'est pourquoi nous commencerons par nous restreindre au sous-espace LO décrit ci-dessus dans la recherche de la structure apparaissant à la transition même lorsque celle-ci est du premier ordre. Nous allons montrer que le paramètre d'ordre le plus stable est alors unidimensionnel et plan, de la forme $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$. Avec un paramètre d'ordre de la forme (3.1), l'énergie libre est donnée par l'expression (2.66) avec $\tilde{\mathbf{q}}_j^{\,2} = q_0^2$.

On voit dans l'expression (2.66) de l'énergie libre que le couplage entre les vecteurs d'onde provient uniquement du terme d'ordre 4 en Δ. Afin d'expliciter ce couplage, on définit β selon :

$$\begin{aligned} 2\beta q_0^2 \sum_{\mathbf{q}_i} \tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_1}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_3}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4} &= \sum_{\mathbf{q}_i} (\tilde{\mathbf{q}}_1\cdot\tilde{\mathbf{q}}_3 + \tilde{\mathbf{q}}_2\cdot\tilde{\mathbf{q}}_4)\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_1}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_3}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4} \\ &= -\int \tilde{\Delta}^2(\nabla\tilde{\Delta}^*)^2 + c.c., \end{aligned} \tag{3.2}$$

β est forcément compris entre -1 et $+1$. L'onde plane de Fulde-Ferrell donne par exemple $\beta = 1$. Nous verrons qu'on peut minimiser β par un choix plus astucieux du paramètre d'ordre. Si $N \equiv N_2$ est le nombre de vecteurs d'onde intervenant dans l'expression (3.1) du paramètre d'ordre, on pose :

$$N_2\bar{\Delta}^2 \equiv \int d\mathbf{r}|\tilde{\Delta}|^2, \tag{3.3}$$

$\bar{\Delta}$ est une mesure de l'amplitude du paramètre d'ordre. De la même façon, on définit N_4 et N_6 selon :

$$\int d\mathbf{r}|\tilde{\Delta}|^4 = N_4\bar{\Delta}^4, \tag{3.4}$$

$$\int d\mathbf{r}|\tilde{\Delta}|^6 = N_6\bar{\Delta}^6. \tag{3.5}$$

Pour l'onde plane de Fulde-Ferrell, $N_2 = 1$, $N_4 = 1$ et $N_6 = 1$. On peut utiliser les relations $\int d\mathbf{r}|\tilde{\Delta}|^4 = \sum_{\mathbf{q}_i}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_1}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_3}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4}$ et $\int d\mathbf{r}|\tilde{\Delta}|^6 = \sum_{\mathbf{q}_i}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_1}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_3}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4}\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_5}\tilde{\Delta}^*_{\mathbf{q}_6}$, où les conservations de moments $\tilde{\mathbf{q}}_1+\tilde{\mathbf{q}}_3 = \tilde{\mathbf{q}}_2+\tilde{\mathbf{q}}_4$ et $\tilde{\mathbf{q}}_1+\tilde{\mathbf{q}}_3+\tilde{\mathbf{q}}_5 = \tilde{\mathbf{q}}_2+\tilde{\mathbf{q}}_4+\tilde{\mathbf{q}}_6$ sont implicites, afin de récrire l'énergie libre (2.66) sous la forme :

$$\tilde{F} = N_2\bar{\Delta}^2\left(A_0 - \frac{1}{3}q_0^2 + \frac{1}{5}q_0^4\right) - N_4\bar{\Delta}^4\left(\frac{1}{4} - \frac{\alpha}{2}q_0^2\right) + \frac{1}{8}N_6\bar{\Delta}^6 \tag{3.6}$$

où l'on a posé $\alpha = (\beta+2)/3$.

Le problème est maintenant bien posé, il s'agit de minimiser l'énergie libre par rapport aux paramètres β, N_2, N_4, N_6 et q_0 afin de trouver la forme la plus stable. L'extremisation de $\tilde{F}$ par rapport à q_0^2 conduit à la condition

$$q_0^2 = \frac{5}{6} - \frac{5}{4}\alpha(N_4/N_2)\bar{\Delta}^2, \tag{3.7}$$

ce qui donne une limite supérieure pour $\bar{\Delta}^2$: $\bar{\Delta}^2_{max} = (2/3\alpha)N_2/N_4$. Au-delà de cette valeur, on retrouve un paramètre d'ordre homogène correspondant à $q_0 = 0$.

En substituant q_0 par son expression dans (3.7), on obtient une nouvelle expression pour l'énergie libre :

$$\tilde{F} = N_2 \left(A_0 - \frac{5}{36} \right) \bar{\Delta}^2 + N_4 \bar{\Delta}^4 \left(\frac{5\alpha}{12} - \frac{1}{4} \right) + \bar{\Delta}^6 \left(\frac{N_6}{8} - \frac{5\alpha^2}{16} \frac{N_4^2}{N_2} \right). \qquad (3.8)$$

L'instabilité FFLO est donnée par $A_0 = 5/36$. Si l'on est intéressé par une meilleure solution correspondant à une transition du premier ordre, il faut faire en sorte que la somme des deux derniers termes de l'expression (3.8) soit négative. Or pour $\bar{\Delta} = \bar{\Delta}_{max}$, cette somme est égale à $\bar{\Delta}_{max}^4 (N_4/24\alpha)[5(\alpha - \frac{3}{5})^2 + 2N_2N_6/N_4^2 - \frac{9}{5}]$ et est donc toujours positive puisqu'on a $N_2N_6 \geq N_4^2$. Cette dernière inégalité se démontre à partir de l'inégalité de Schwartz : $(\int |fg|)^2 \leq (\int |f|^2)(\int |g|^2)$. En posant, $f = \tilde{\Delta}^3$ et $g = \tilde{\Delta}$, on obtient :

$$\left(\int d\mathbf{r} |\tilde{\Delta}|^4 \right)^2 \leq \left(\int d\mathbf{r} |\tilde{\Delta}|^6 \right) \left(\int d\mathbf{r} |\tilde{\Delta}|^2 \right) \qquad (3.9)$$

Une transition du premier ordre n'est ainsi possible que si le terme en $\bar{\Delta}^4$ de l'expression (3.8) est négatif, c'est-à-dire pour $\alpha < 3/5$. Cette condition étant réalisée, l'énergie a la forme donnée par la figure 3.3 et on trouve la valeur suivante pour A_0 à la transition :

$$A_0 = \frac{5}{36} + \frac{1}{8} \frac{(1 - \frac{5\alpha}{3})^2}{\frac{N_2N_6}{N_4^2} - \frac{5}{2}\alpha^2}, \qquad (3.10)$$

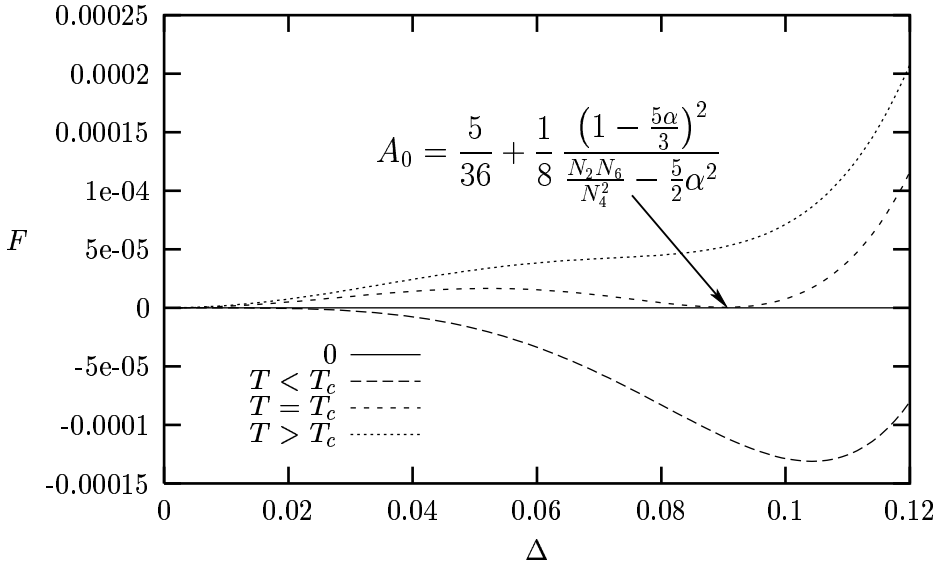


FIG. 3.3: Énergie libre non minimisée $\tilde{F}$ en fonction de l'amplitude du paramètre d'ordre $\bar{\Delta}$ pour différentes températures. Cette allure est caractéristique d'une transition du premier ordre (voir **encadré** 3).

et pour l'amplitude du paramètre d'ordre :

$$\bar{\Delta}_m^2 = \frac{N_2}{N_4} \frac{1 - \frac{5\alpha}{3}}{\frac{N_2 N_6}{N_4^2} - \frac{5}{2}\alpha^2}. \tag{3.11}$$

Il s'agit maintenant de vérifier que l'on peut obtenir $\alpha < 3/5$ puis d'optimiser la position de la ligne de transition donnée par l'expression (3.10). La minimisation de β (équivalente à celle de α) est en fait réalisée pour tout paramètre d'ordre réel. On a de façon générale $\beta \geq -1/3$ avec égalité si le paramètre d'ordre est réel. Comme $3/5$ est très proche de la valeur minimale de α, à savoir $5/9$, les variations du dénominateur de l'expression (3.10) avec α ne sont pas pertinentes comparées aux variations du numérateur avec ce même α. On minimise donc α avant de considérer le dénominateur.

Minimiser α, et par conséquent β, revient à rendre le terme en $\bar{\Delta}^4$ dans l'expression (3.6) le plus négatif possible. On utilise l'inégalité suivante :

$$\int \left[\tilde{\Delta}^2(\nabla\tilde{\Delta}^*)^2 - |\tilde{\Delta}|^2|\nabla\tilde{\Delta}|^2\right] + c.c. = \int \left[\tilde{\Delta}\nabla\tilde{\Delta}^* - c.c.\right]^2 \leq 0 \tag{3.12}$$

qui devient une égalité pour un paramètre d'ordre réel. En intégrant par parties, on trouve :

$$\int \left[\tilde{\Delta}^2(\nabla\tilde{\Delta}^*)^2 + 2|\tilde{\Delta}|^2|\nabla\tilde{\Delta}|^2\right] + c.c. = -\int |\tilde{\Delta}|^2(\tilde{\Delta}\nabla^2\tilde{\Delta}^* + c.c.) = 2q_0^2 \int |\tilde{\Delta}|^4 \tag{3.13}$$

où l'on a utilisé la forme (3.1) du paramètre d'ordre. Partant de (3.13), on obtient :

$$\begin{aligned} -2\beta q_0^2 \int |\tilde{\Delta}|^4 = \int \tilde{\Delta}^2(\nabla\tilde{\Delta}^*)^2 + c.c. \leq \int \Big[\tilde{\Delta}^2(\nabla\tilde{\Delta}^*)^2 \\ -\frac{2}{3}\left[\tilde{\Delta}^2(\nabla\tilde{\Delta}^*)^2 - |\tilde{\Delta}|^2|\nabla\tilde{\Delta}|^2\right]\Big] + c.c. = \\ \frac{1}{3}\int \left[\tilde{\Delta}^2(\nabla\tilde{\Delta}^*)^2 + 2|\tilde{\Delta}|^2|\nabla\tilde{\Delta}|^2\right] + c.c. = \frac{2}{3}q_0^2 \int |\tilde{\Delta}|^4 \end{aligned} \tag{3.14}$$

d'où l'inégalité cherchée $\beta \geq -1/3$. L'expression (3.1) implique que $\tilde{\Delta}(\mathbf{r})$ est réel si et seulement si $\tilde{\Delta}_{\mathbf{q}_j}^* = \tilde{\Delta}_{-\mathbf{q}_j}$ ce qui donne pour le paramètre d'ordre une combinaison de $\cos(\tilde{\mathbf{q}}_j \cdot \mathbf{r} + \phi_j)$ avec des coefficients réels, les phases ϕ_j étant libres.

Cette forme simplifiée du paramètre d'ordre pour laquelle α est minimisé permet de calculer analytiquement N_2, N_4 et N_6 en fonction des poids des différents cosinus (voir la **publication I**).

On peut tirer de la minimisation de N_2N_6/N_4^2 différentes conclusions :

- Pour un nombre fixé de paires de vecteurs d'onde, il est favorable d'égaler les contributions des cosinus. Chaque configuration, pour laquelle les poids des différents cosinus sont égaux, est un minimum local de l'énergie libre tant que l'on se restreint au sous-espace LO. On ne peut cependant rien conclure sur les directions respectives des vecteurs d'onde.
- Pour N vecteurs d'onde de poids respectifs équilibrés - N pair -, on peut calculer $N_2N_6/N_4^2 = [15N^2 - 45N + 40]/9(N-1)^2$. Cette expression augmente régulièrement avec N si bien que le minimum est atteint pour $N = 2$. Dans ce cas, $N_2N_6/N_4^2 = 10/9$.

L'état de plus basse énergie est donc simplement la somme de deux ondes planes contrepropageantes et équilibrées, ce qui donne un paramètre d'ordre unidimensionnel de la forme $\tilde{\Delta}(\mathbf{r}) = 2\tilde{\Delta}_m \cos(q_0 x)$. La valeur correspondante de A_0 à la transition est $A_0 = 5/36 + 2.02 \times 10^{-3}$ et l'écart avec l'instabilité FFLO est relativement faible, plus faible encore que l'écart entre la limite de Clogston-Chandrasekhar et l'instabilité FFLO. La transition FFLO est donc du premier ordre mais est très proche d'une transition du second ordre. Nous confirmerons ce résultat à plus basse température dans le chapitre 4.

On peut à 2D effectuer la même étude systématique de l'énergie libre. Par exemple, dans l'expression (3.8), le terme en $\bar{\Delta}^4$ est remplacé par $N_4(2\alpha - 1)/4$. Comme à 3D, l'ordre de la transition est lié à la possibilité de rendre ce terme négatif. Or lorsque α prend sa valeur minimale, $\alpha = 5/9$, le terme en $\bar{\Delta}^4$ est positif ce qui signifie que la transition est du second ordre, confondue avec l'instabilité FFLO du chapitre 1. De façon plus générale, on peut raisonner sur une dimension d'espace non entière (voir la **publication I**) et on trouve que la dimension critique où la transition change d'ordre est $D = 2.5$. La transition du premier ordre à trois dimensions est donc proche d'être une transition du second ordre ce qui explique sa proximité avec l'instabilité FFLO. Cependant l'amplitude du paramètre d'ordre à la transition $\tilde{\Delta}_m \simeq 0.27$ est loin d'être négligeable comparée par exemple à l'amplitude de la transition de Clogston-Chandrasekhar pour laquelle $\tilde{\Delta} = 1$. Par conséquent, on peut très certainement distinguer expérimentalement cette transition, qui est faiblement du premier ordre, d'une transition du second ordre. Ce résultat sera confirmé à plus basse température dans le chapitre 4 en accord avec la référence [79].

A deux dimensions, la transition est du second ordre et on peut donc revenir à l'étude du 2.4.2 et négliger le terme en $\bar{\Delta}^6$ dans le développement (3.6) de l'énergie. On trouve que l'état favorisé au voisinage de la transition est encore la forme planaire sinusoïdale $\tilde{\Delta}(\mathbf{r}) = \bar{\Delta}\cos(q_0 x)$. C'est en particulier l'état étudié par Burkhardt et Rainer [37] à toute température.

3.1.3 Au-delà du sous-espace LO

La restriction au sous-espace LO, justifiée lorsqu'on ne garde que le terme d'ordre 4 dans l'énergie, ne l'est plus dès lors que la transition est du premier ordre et que l'on inclut les termes d'ordre 6. L'équation d'Euler-Lagrange (ou équation du gap (2.14)) correspondant à l'énergie (2.67) contient des non linéarités provenant des termes d'ordre 4 et 6 en Δ et il est clair que la forme du paramètre d'ordre $\tilde{\Delta}(\mathbf{r}) = 2\tilde{\Delta}_m \cos(q_0 x)$ n'est pas solution de cette équation et ne peut donc pas être l'état de plus basse énergie.

Néanmoins, nous allons voir que les non linéarités ont finalement peu d'influence sur la forme de la solution minimale. Nous allons considérer un paramètre d'ordre unidimensionnel et réel, nous montrerons alors que l'état de plus basse énergie est *proche* de $\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$. Cette démonstration n'est sûrement pas suffisante car les non linéarités des formes bidimensionnelles ou tridimensionnelles peuvent être plus importantes. On peut toutefois mentionner l'étude numérique de Houzet *et coll.* [77], réalisée au voisinage du point tricritique, dans laquelle c'est une

forme unidimensionnelle qui donne l'état de plus basse énergie. Cette forme est par ailleurs précisément celle que nous allons obtenir dans ce qui suit.

Un paramètre d'ordre unidimensionnel et réel donne une énergie libre de la forme :

$$\tilde{F} = \int dx \left[\left(A_0 \tilde{\Delta}^2 - \frac{1}{3}\tilde{\Delta}'^2 + \frac{1}{5}\tilde{\Delta}''^2 \right) - \left(\frac{1}{4}\tilde{\Delta}^4 - \frac{5}{6}\tilde{\Delta}^2\tilde{\Delta}'^2 \right) + \frac{1}{8}\tilde{\Delta}^6 \right]. \quad (3.15)$$

où $\tilde{\Delta}$ ne dépend que de x. On peut minimiser cette énergie libre par rapport à l'amplitude du paramètre d'ordre [1] puis chercher à annuler l'énergie de ce minimum pour trouver la transition du premier ordre. On obtient ainsi une expression donnant la position de la transition en fonction de la forme du paramètre d'ordre :

$$A_0 = \frac{[\int \tilde{\Delta}^4 - \frac{10}{3}(\tilde{\Delta}\tilde{\Delta}')^2]^2}{8 \int \tilde{\Delta}^2 \int \tilde{\Delta}^6} + \frac{\int \left(\frac{1}{3}\tilde{\Delta}'^2 - \frac{1}{5}\tilde{\Delta}''^2 \right)}{\int \tilde{\Delta}^2}, \quad (3.16)$$

le paramètre d'ordre étant aussi solution de $\int \tilde{\Delta}^6 = \int \left(\tilde{\Delta}^4 - 10\tilde{\Delta}^2\tilde{\Delta}'^2/3 \right)$. Ces deux expressions se combinent en :

$$A_0 = \frac{1}{8}\frac{\int \tilde{\Delta}^6}{\int \tilde{\Delta}^2} + \frac{\int \left(\frac{1}{3}\tilde{\Delta}'^2 - \frac{1}{5}\tilde{\Delta}''^2 \right)}{\int \tilde{\Delta}^2}. \quad (3.17)$$

Le deuxième terme de cette expression de A_0 provient du terme quadratique dans l'énergie correspondant à l'ordre le plus bas en Δ. Pour $\tilde{\Delta}(x) \propto \cos(q_0 x)$ et en ne conservant que le second terme de (3.17), on trouve $A_0 = q_0^2/3 - q_0^4/5$. C'est une sorte de potentiel inversé qui sélectionne les vecteurs d'onde autour de $\tilde{q}_{FFLO}^2 = 5/6$ correspondant à $A_0 = 5/36$. C'est l'équivalent du potentiel présenté figure 3.1. Si le paramètre d'ordre a une faible amplitude, alors le premier terme dans l'expression 3.17 a moins d'influence que le second et le potentiel FFLO va sélectionner les vecteurs d'onde au voisinage du maximum $\tilde{q}_{FFLO}$.

C'est effectivement ce que l'on trouve dans l'étude numérique de l'équation d'Euler-Lagrange correspondant à la minimisation de l'énergie libre :

$$\frac{1}{5}\tilde{\Delta}'''' + (\frac{1}{3} - \frac{5}{6}\tilde{\Delta}^2)\tilde{\Delta}'' - \frac{5}{6}\tilde{\Delta}\tilde{\Delta}'^2 + \frac{3}{8}\tilde{\Delta}^5 - \frac{1}{2}\tilde{\Delta}^3 + A_0\tilde{\Delta} = 0. \quad (3.18)$$

$\tilde{\Delta} \propto \cos(q_0 x)$ est solution de la partie linéaire de cette équation pour laquelle on retrouve la condition $A_0 = q_0^2/3 - q_0^4/5$. Il est cependant clair que la forme sinusoïdale n'est pas solution de l'équation complète. L'exploration des solutions numériques de l'équation 3.18 donne un certain nombre d'indications sur le spectre du paramètre d'ordre. Dans l'exploration (voir la **publication I**) des solutions de l'équation (3.18), on trouve que seules une ou deux fréquences de base q_0 et q_1 apparaissent autour de $\tilde{q}_{FFLO}$. Les autres fréquences sont des harmoniques impaires formées à partir des deux fréquences de base comme, par exemple, $2q_0 \pm$

[1] on écrit par exemple $\tilde{\Delta}(x) = a\delta(x)$ avec la normalisation $\int dx \delta^2 = 1$, $\tilde{F}$ étant maintenant une fonction de a et de $\delta(x)$.

q_1, $3q_0$, $4q_1 \pm q_0$,etc. Leurs poids sont assez faibles comparés aux fréquences de base q_0 et q_1 et ce d'autant plus qu'elles sont d'ordres élevés. La présence de deux fréquences de base peut être étudiée analytiquement dans ces cas simples. On montre alors que la présence d'une seule fréquence q_0 est toujours préférable énergétiquement à deux fréquences même lorsque la différence entre les fréquences tend vers zéro. Ceci explique notamment pourquoi on n'obtient pas un continuum de fréquences autour de $\tilde{q}_{FFLO}$.

La fréquence q_0 va donc être prédominante et elle est couplée aux harmoniques impaires $3q_0$, $5q_0$, etc. Afin de caractériser le fondamental dont on connaît maintenant la forme, on choisit une fonction test de la forme $\tilde{\Delta}(x) = 2a[\cos(q_0 x) + a_3 \cos(3q_0 x + \phi_1) + a_5 \cos(5q_0 x + \phi_2)]$ et on minimise numériquement A_0 donné par (3.16). On trouve $a = 0.315$, $a_3 = -1.33 \times 10^{-2}$, $a_5 = 1.62 \times 10^{-4}$, $q_0 = 0.793$, $\phi_{1,2} = 0$ et $A_0 = 0.141604 = 5/36 + 2.72 \times 10^{-3}$ en accord avec Houzet *et coll.* [77]. Cette minimisation confirme que l'état d'énergie minimale est très proche de la solution trouvée dans le sous-espace LO, c'est-à-dire très proche d'un cosinus.

Faiblesse des non linéarités

Les conclusions précédentes montrent que le potentiel FFLO (voir figure 3.1) domine les non linéarités dont le seul effet est de modifier légèrement la forme de la structure de plus basse énergie. Cet effet peut se comprendre même lorsqu'on se restreint au sous-espace LO. Si l'on considère la formule (3.7) qui donne le décalage du vecteur d'onde optimal par rapport à la solution FFLO $\tilde{q}^2_{FFLO} = 5/6$, on constate que ce décalage augmente avec $\bar{\Delta}$. Autrement dit, les non linéarités ont d'autant plus d'effet que l'amplitude du paramètre d'ordre est grande. Pour la forme en cosinus, $\bar{\Delta}_m = 0.27$ à la transition. On ne peut pas conclure que c'est petit mais cela donne un faible décalage pour la fréquence optimale ; $q_0 = 0.829$ au lieu de $\tilde{q}_{FFLO} = 0.913$. Par conséquent, on peut raisonnablement penser que le potentiel FFLO est toujours fortement sélectif malgré la présence des non linéarités. Les harmoniques ont alors des poids très faibles puisqu'elles soient loin du minimum du potentiel FFLO. On constate d'ailleurs que la valeur trouvée pour q_0 pour le vrai fondamental, $q_0 = 0.793$, est proche de 0.829 et de 0.913. De même, $a = 0.315$ est proche de $\bar{\Delta}_m = 0.27$.

Le comportement devient très différent dès lors que l'on pénètre plus à l'intérieur de la phase condensée. A_0 diminue ce qui a pour effet d'augmenter l'amplitude du paramètre d'ordre à l'équilibre, donc d'augmenter l'effet des non linéarités. En particulier, si l'on reprend la condition (3.7), on voit que le vecteur d'onde décroît (ou de façon équivalente la période du paramètre d'ordre augmente) si bien que les harmoniques ont des poids de plus en plus importants. Peu à peu, la solution s'écarte du simple cosinus et on ne peut pas traiter le passage vers la phase homogène en se restreignant au sous-espace LO. Ce régime a été étudié à 2D [37] et 3D [77]. De façon assez inattendue, on trouve une transition du second ordre entre les phases FFLO et la phase homogène BCS. Le paramètre d'ordre se transforme en un réseau de solitons lorsqu'on pénètre dans la phase condensée. Entre chaque soliton, le paramètre d'ordre est presque homogène et il change de signe au passage d'un soliton. On a ainsi une structure de phases homogènes sé-

parées par des solitons. Lorsqu'on tend vers la transition entre les phases FFLO inhomogènes et la phase BCS homogène, la période du réseau de solitons tend vers l'infini, c'est-à-dire que les parties homogènes du paramètre d'ordre deviennent de taille macroscopique.

3.1.4 Conclusions et perspectives à plus basses températures

Notre étude systématique du voisinage du point tricritique débouche sur de nombreuses conclusions qu'on peut espérer généraliser aux plus basses températures.

Tout d'abord, on trouve le fait que la transition FFLO, qui est du 2^{e} ordre à 2D, est du 1er ordre à 3D. Restreint au sous-espace LO où le paramètre d'ordre est une simple somme d'ondes planes, on obtient un grand nombre de minima locaux pour lesquels le paramètre d'ordre est réel et les poids des différentes ondes planes sont égaux. Ces minima donnent tous une transition du 1er ordre à 3D. Parmi ces nombreux minima, ceux qui ont le plus petit nombre d'ondes planes sont préférés, le minimum minimorum étant atteint pour $\Delta \sim \cos(qx)$, à 2D et à 3D.

Les conclusions sur les formes les plus stables du paramètre d'ordre sont peu modifiées si l'on sort du sous-espace LO à 3D. Les non linéarités changent peu les minima et les harmoniques qu'elles engendrent sont de faible amplitude. La transition est en fait faiblement du premier ordre. Sa position est très proche de la ligne d'instabilité FFLO obtenue dans le chapitre 1 et qui correspond à l'annulation du terme du second l'ordre dans le développement de l'énergie. Toutefois, l'amplitude du paramètre d'ordre reste appréciable sur la ligne de transition.

La situation à l'équilibre des différentes phases FFLO est assez remarquable. En plus de l'état de plus basse énergie que nous avons déterminé, le système possède un grand nombre d'états excités dont l'énergie est très proche du fondamental. L'étude des modes collectifs réserve vraisemblablement des surprises et devraient donner des comportements différents de ceux qu'on peut avoir pour la phase BCS homogène.

3D : perspectives à basse température

Que se passe-t-il lorsqu'on s'éloigne du point tricritique et comment traiter analytiquement le problème ?

Il est très vraisemblable que la transition reste longtemps du premier ordre [38] et que l'amplitude du paramètre d'ordre n'y soit pas négligeable. Cependant, on s'attend à ce que la forme du paramètre d'ordre reste proche d'une simple somme d'ondes planes comme c'est le cas au voisinage du point tricritique. La raison en est que la physique de l'apparition des phases FFLO, même pour une transition du 1er ordre, est dominée par l'instabilité FFLO qui est donnée par le second ordre du développement de l'énergie libre.

On peut tout de même essayer de faire un développement de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre. Celui-ci n'est pas petit mais pas non plus très grand et on peut espérer qu'à un certain ordre dans le développement, la transition soit correctement décrite. Cette approche a été entreprise par Houzet *et col.*

[77] mais sans succès car les différents coefficients du développement changent fréquemment de signe en fonction de la température ce qui invalide automatiquement le développement. Ce comportement est en fait déjà visible et de façon assez générale dans deux cas simples que sont la phase homogène BCS (voir la sous-section 2.2.1) et l'onde plane de FF (voir la sous-section 2.2.2).

Pour la phase homogène, le développement de l'énergie à température non nulle est donné par :

$$\Omega = a_0(\bar{\mu}, T)\Delta^2 + \sum_{p=1}^{+\infty}(-1)^p \frac{(2p)!}{2^{2p}p!(p+1)!} a_{2p}\Delta^{2p+2}, \tag{3.19}$$

avec

$$a_{2p} = -2\bar{\mu}^{2p}\pi T \,\mathrm{Re}\sum_{\mathrm{n}=0}^{+\infty} \frac{1}{(\omega_\mathrm{n} - \mathrm{i}\bar{\mu})^{2\mathrm{p}+1}}. \tag{3.20}$$

Pour $\bar{\mu}/T \to 0$, chacun des a_{2p} est négatif, mais lorsqu'on descend en température, on trouve que $a_{2p}(\bar{\mu}/T)$ a p zéro dans l'intervalle $[0, +\infty[$. Cette singularité se retrouve d'ailleurs dans l'expression de l'énergie libre (2.34) à température nulle pour $\Delta = \bar{\mu}$. Les multiples changements de signe qui empêchent une étude de la transition par développement de l'énergie libre sont donc liés à cette singularité à température nulle.

Pour l'état de Fulde-Ferrell à température nulle, la singularité dans l'énergie libre (2.38) est pour $\Delta = \bar{\mu}(\bar{q} \pm 1)$. La plus petite des singularités $\Delta = \bar{\mu}(\bar{q} - 1)$ fixe le rayon de convergence d'un développement en Δ. En particulier, aucun développement ne sera possible à 2D et à $T = 0$. A 3D et à $T = 0$, $\bar{q} \simeq 1.2$ reste proche de $\bar{q} = 1$ ce qui signifie qu'un développement n'est possible que pour de très petites valeurs de Δ.

Ces deux arguments montrent l'inadéquation d'un développement de l'énergie pour étudier la transition FFLO à 3D. Nous avons testé une idée consistant à resommer des termes dans le développement de l'énergie de façon à obtenir des contributions qui ne s'annulent pas (on peut notamment le faire pour les termes correspondant à l'onde plane de Fulde-Ferrell). Cette méthode améliore quelque peu le développement mais, en plus d'être fastidieuse, ne donne pas vraiment de résultats à très basse température.

Nous allons voir dans le chapitre 4 une reformulation quasiclassique exacte des équations de Gorkov. Le fait que la forme du paramètre d'ordre soit proche d'une somme d'ondes planes va nous permettre de résoudre complètement le problème de la transition FFLO grâce à un développement de Fourier de ces équations quasiclassiques.

3.2 Cascade à deux dimensions

L'étude de la transition au voisinage du point tricritique a montré que celle-ci est du second ordre à deux dimensions. Ce résultat a été étendu à toute température par Burkhardt et Rainer [37] pour un paramètre d'ordre unidimensionnel. Il est ainsi vraisemblable de supposer que, même pour une forme du paramètre

d'ordre plus complexe, la transition est toujours du second ordre à 2D ce que nous vérifierons *a posteriori* dans cette section. Pour une transition du second ordre, le paramètre d'ordre tend vers zéro à la transition et la structure de l'état de plus basse énergie, juste à proximité de la ligne de transition, s'obtient par l'étude des premiers ordres du développement de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre. C'est l'approche de Larkin et Ovchinnikov [3] que nous avons déjà présentée dans la sous-section 2.4.2.

La forme $\Delta(\mathbf{r}) \sim \cos(qx)$, favorisée près du point tricritique, entre en compétition pour de plus basses températures avec d'autres superpositions d'ondes planes dont les vecteurs d'onde ont le même module. Ce module est fixé par la minimisation du terme d'ordre 2 en Δ dans le développement de l'énergie libre et la position de la ligne de transition est donnée par l'annulation de ce terme d'ordre 2. L'ordre 4 du développement de l'énergie libre en Δ va nous permettre de distinguer énergétiquement les différentes structures en compétition et de déterminer la plus favorable.

Le cas 2D est particulièrement intéressant car la situation à $T = 0$ est singulière. Considérons par exemple le cas de l'onde plane de Fulde-Ferrell dont l'énergie est donnée par l'équation (2.37). Le développement de cette énergie en fonction de Δ a pour rayon de convergence $\Delta = \bar{\mu}(\bar{q} - 1)$ que ce soit à 2D ou à 3D. Or, à 2D, on a précisément $\bar{q} = 1$ à température nulle (voir figure 1.5) ce qui donne un rayon de convergence nul. Le développement de l'énergie libre d'une onde plane n'est donc pas analytique à température nulle pour $\bar{q} = 1$. Si l'on calcule les différents termes du développement de l'expression (2.37), on trouve qu'ils divergent tous pour la valeur particulière $\bar{q} = 1$. L'expression générale de l'énergie libre incluant les termes apparaissant dans le calcul de l'onde plane, cette non analyticité est toujours présente, même pour une forme plus complexe du paramètre d'ordre.

Nous allons voir que cette singularité à température nulle est à l'origine d'une cascade de transitions entre des structures de plus en plus complexes du paramètre d'ordre quand $T \to 0$ avec $T \neq 0$.

De façon à étudier la compétition entre structures du paramètre d'ordre, nous allons calculer les termes d'ordres 2 et 4 en Δ dans le développement de l'énergie libre. D'une part, nous calculerons ces termes numériquement, et d'autre part nous montrerons que leur développement asymptotique à basse température est quantitativement correct jusqu'à des températures relativement élevées. Nous montrerons ensuite, d'abord à partir d'arguments simples, puis selon une démonstration plus rigoureuse, l'apparition d'une cascade de structures lorsque la température tend vers zéro. Finalement, nous montrerons, en utilisant nos développements à très basse température, que la transition entre l'état normal et les phases FFLO reste toujours du second ordre et que les paramètres d'ordre les plus stables sont des sommes de cosinus.

3.2.1 Terme d'ordre 2

La transition étant du second ordre, on retrouve le sous-espace LO, c'est-à-dire un paramètre d'ordre de la forme :

$$\Delta(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}_j} \Delta_{\mathbf{q}_j} e^{i\mathbf{q}_j \cdot \mathbf{r}} \tag{3.21}$$

avec $|\mathbf{q}_j| = q$ pour les N vecteurs d'onde. L'énergie est donnée par l'expression (2.60) où l'on néglige les termes d'ordre supérieur à 4 en $\Delta(\mathbf{r})$. Concentrons nous d'abord sur le terme d'ordre 2. Son annulation redonne l'équation d'instabilité FFLO (1.20) qu'on peut écrire $\Omega_2(q, \bar{\mu}, T) = a_0(\bar{\mu}, T) + I(\bar{q}, \bar{\mu}, T) = 0$ avec

$$I(\bar{q}, \bar{\mu}, T) = 2\pi T \mathrm{Re} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{\bar{\mu}^2 \bar{q}^2 + \bar{\omega_n}^2}} - \frac{1}{\bar{\omega_n}} \right), \tag{3.22}$$

où $\bar{\omega_n} = \omega_n - i\bar{\mu}$ et $a_0(\bar{\mu}, T)$ est donnée par l'équation (2.31). On peut récrire $I(\bar{q}, \bar{\mu}, T)$ sous la forme d'une intégrale dans le plan complexe dont on peut déformer le contour afin d'obtenir (la partie du contour à l'infini donne une contribution nulle) :

$$I(\bar{q}, \bar{\mu}, T) = -\frac{1}{2} \mathrm{Re} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right) \left[\frac{1}{\sqrt{(\omega + \bar{\mu})^2 - \bar{\mu}^2 \bar{q}^2}} - \frac{1}{\omega + \bar{\mu}} \right], \tag{3.23}$$

l'intégration étant effectuée légèrement au-dessus de l'axe réel. Cette expression est plus commode pour de petites températures. A température nulle, l'intégration donne

$$I(\bar{q}, \bar{\mu}, T) = \mathrm{Re} \ln(1 + \sqrt{1 - \bar{q}^2}) - \ln 2 \tag{3.24}$$

dont le minimum est atteint pour $\bar{q} = 1$. Notons que $\bar{q} = 1$ est un point singulier pour I, la dérivée de I par rapport à $\bar{q}$ étant discontinue en ce point. Cette singularité est une trace de la non analyticité que nous avons décrite précédemment.

Pour $T \neq 0$, le comportement de I n'est pas singulier et on peut dériver son expression par rapport à $\bar{q}$ pour trouver son minimum. On obtient ainsi, après intégration par parties, la condition suivante :

$$\mathrm{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \frac{1}{\cosh^2 y} \, \frac{1 + 2ty}{\sqrt{(1 + 2ty)^2 - \bar{q}^2}} = 2, \tag{3.25}$$

où nous avons effectué le changement de variable $y = \omega/T$ et défini la température réduite $t = T/\bar{\mu}$. Le facteur $\cosh^{-2} y$ dans l'intégrale, qui décroît exponentiellement, implique que seules les valeurs de y autour de 0 donnent une contribution significative. Par ailleurs, seuls les domaines $y > (\bar{q} - 1)/2t$ et $y < -(\bar{q} + 1)/2t$ donnent une contribution à la partie réelle de l'intégrale. Comme $\bar{q} \simeq 1$ pour de faibles températures, on en déduit que le domaine $y < -(\bar{q} + 1)/2t$ donne en fait une contribution exponentiellement petite pour de faibles températures, contribution que l'on peut négliger.

La contribution restante peut se développer en fonction de la température réduite t, on obtient à l'ordre le plus bas :

$$\bar{q} - 1 = \frac{t}{2} \ln \frac{\pi}{2t}, \tag{3.26}$$

ce qui redonne $\bar{q} \to 1$ quand $t \to 0$ mais avec $a \equiv (\bar{q} - 1)/2t \gg 1$.

On peut en fait obtenir un développement plus complet de $\bar{q}$ à partir de l'expression (3.25). On néglige encore le domaine d'intégration dont la contribution est exponentiellement petite et on obtient après le changement de variable $y = u^2 + a$:

$$\int_0^{+\infty} du \frac{1 + 2\bar{t}u^2}{\cosh^2(u^2 + a)\sqrt{1 + \bar{t}u^2}} = 2\sqrt{\bar{t}}, \tag{3.27}$$

où $\bar{t} = t/\bar{q}$ est la bonne variable réduite à considérer (essentiellement $\bar{q} \simeq 1$ pour de petites températures). Cette nouvelle expression peut se développer en fonction de $\bar{t}^{1/2}$ et on obtient finalement le développement suivant :

$$a = \frac{1}{4} \ln \left(\frac{\pi}{2\bar{t}} \right) - \sqrt{\frac{\bar{t}}{\pi}} + \bar{t} \left(\frac{3}{16} + \frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{3}{\pi} \right) + \mathcal{O}(\bar{t}^{3/2}). \tag{3.28}$$

Cette expression comparée au résultat numérique direct donne un excellent accord jusqu'à des températures assez élevées (voir figure 3.4)

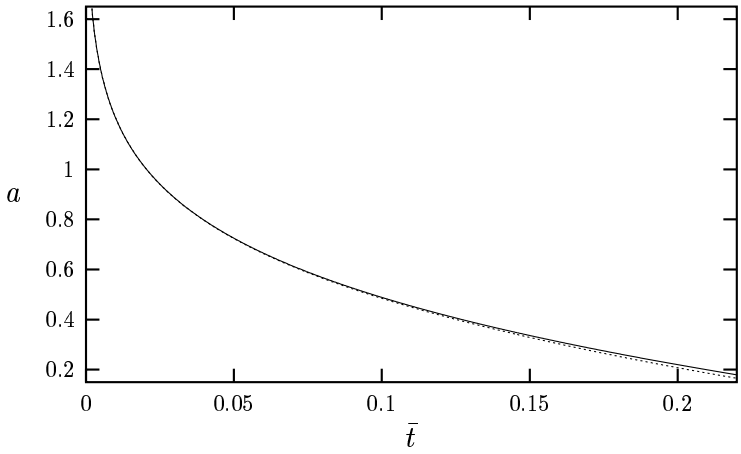


FIG. 3.4: Courbe donnant $a \equiv (\bar{q} - 1)/2t$ en fonction de la température réduite $\bar{t} = T/(\bar{q}\bar{\mu})$. La courbe en pointillés représente le calcul exact obtenu à partir de la sommation sur les fréquences de Matsubara de l'équation (3.23). La courbe pleine correspond au développement asymptotique à basse température (3.28).

3.2.2 Terme d'ordre 4

Le terme d'ordre 2 donne la valeur du vecteur d'onde optimal ainsi que la position de la transition. Le terme d'ordre 4 est nécessaire pour différencier les différentes combinaisons d'ondes planes. Il est donné par l'expression (2.62) où les

fonctions $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$ sont explicitées dans les équations (2.63) et (2.64). Cette forme simplifiée provient de la conservation des moments associée au fait que les différents vecteurs d'onde ont le même module (voir 2.4.2). Sa minimisation est nécessaire pour déterminer l'état de plus basse énergie.

La forme du terme d'ordre 4, qui ne dépend que des angles entre vecteurs d'onde, implique une analogie formelle entre notre recherche du minimum et la recherche du fondamental d'un système de vecteurs d'onde sur un cercle dont les interactions entre vecteurs d'onde sont uniquement des interactions de paires données par les fonctions $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$. Cette analogie formelle va guider notre raisonnement si bien que nous parlerons abusivement d'interactions entre vecteurs d'onde.

L'intégration sur ξ puis l'intégration angulaire des expressions (2.63) et (2.64) sont faisables analytiquement. On obtient une somme sur les fréquences de Matsubara qu'on peut calculer numériquement. Il est toutefois possible de continuer le calcul analytique des fonctions $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$ dans le régime des basses températures sous la forme d'un développement en $\bar{t}$ comme celui effectué pour a. C'est ce développement que nous allons présenter maintenant.

Calcul de $J(\alpha)$

Le calcul complet est présenté en annexe B. Sans aucune approximation, on obtient l'expression suivante :

$$16t\bar{\mu}^2\bar{q}J(\alpha) = -\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} dY\, \frac{1}{\cosh^2((\bar{q}Y-1)/2t)}\frac{Y}{(Y^2-Y_1^2)\sqrt{Y^2-1}} \qquad (3.29)$$

avec $Y_1 = \cos(\alpha/2)$. On se place dans le régime des basses températures, *i.e.* $\bar{t} \ll 1$. Le facteur $\cosh^{-2}((\bar{q}Y-1)/2t)$ est tel que seul le voisinage de $Y=1$ contribue significativement à l'intégrale. Par conséquent, on ne conserve dans le calcul que le pôle $Y = Y_1$ et le domaine $Y > 1$ qui contribuent à la partie réelle de l'intégrale. On note d'ailleurs que le pôle $Y = Y_1$ n'est pertinent que lorsque $Y_1 \to 1$, c'est-à-dire pour $\alpha \to 0$.

En écrivant

$$\frac{Y}{Y^2-Y_1^2} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{Y-Y_1}+\frac{1}{Y+Y_1}\right), \qquad (3.30)$$

on peut séparer $J(\alpha)$ en $J(\alpha) = J_o(\alpha) + J_o(2\pi-\alpha)$ ce qui nous ramène au calcul plus simple de $J_o(\alpha)$ qui donne

$$32\bar{t}\bar{\mu}^2\bar{q}^2 J_o(\alpha) = -\bar{t}^{-1/2}\int_0^{\infty}\frac{du}{\cosh^2(u^2+a)}\frac{1}{(u^2+\beta^2/2)\sqrt{1+\bar{t}u^2}} + \frac{\pi}{\sin(\alpha/2)\cosh^2(a-\beta^2/2)}, \qquad (3.31)$$

où l'on a effectué le changement de variable $(\bar{q}Y-1)/2t = a+u^2$ et posé $\beta^2 = (1-\cos(\alpha/2))/\bar{t}$. Le dernier terme de cette expression provient du pôle en $Y=Y_1$ et ne contribue que pour α proche de 0. Le premier terme peut aisément se

développer en fonction de $\bar{t}$. On obtient :

$$32\bar{t}\bar{\mu}^2\bar{q}^2 J_o(\alpha) = -\bar{t}^{-1/2}\int_0^\infty \frac{du}{\cosh^2(u^2+a)}\frac{1}{u^2+\beta^2/2} + \frac{\pi}{\sin(\alpha/2)\cosh^2(a-\beta^2/2)} + \frac{2\bar{t}}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty dv \frac{v^2\exp(-v^2)}{v^2+\beta^2}, \tag{3.32}$$

où l'on a remplacé a dans le dernier terme par son expression à l'ordre le plus bas $a_0 = \ln(\pi/2\bar{t})/4$. a est calculé ici à l'aide du développement (3.28). Dans cette expression de $J_o(\alpha)$, les deux premiers termes donnent la forme asymptotique, le dernier terme étant seulement une correction en température.
Précisons les cas limites de cette expression à l'ordre le plus bas en $\bar{t}$.

- Lorsque $\alpha \to 0$, le premier terme donne une divergence qui compense la divergence du second terme. Une fois cette compensation effectuée, on peut remplacer a par a_0 et $\cosh^{-2} Z$ par $4\exp(-2Z)$ afin d'obtenir l'ordre dominant en sommant $J_o(\alpha)$ et $J_o(2\pi-\alpha)$. On obtient :

$$J(0) = \frac{1}{4\bar{\mu}^2}\frac{1}{\bar{t}}. \tag{3.33}$$

  $J(0)$ diverge lorsque $\bar{t} \to 0$. Ce comportement est attendu puisque $J(0)$ est le seul terme intervenant dans le calcul de l'énergie libre pour une onde plane. Cette divergence est donc liée à la non analyticité de l'énergie libre à $T = 0$.
- Pour α fixé et $\bar{t} \to 0$, le second terme de l'expression (3.32) est négligeable. Dans la limite $\bar{t} \to 0$, $\beta \to +\infty$: ce sont donc les grandes valeurs de u qui contribuent dans la première intégrale de l'expression (3.32). On peut donc remplacer a par a_0 et $\cosh^{-2} Z$ par $4\exp(-2Z)$. Ceci conduit après sommation de $J_o(\alpha)$ et $J_o(2\pi-\alpha)$ à

$$J(\alpha) = -\frac{1}{4\bar{\mu}^2}\frac{1}{\sin^2(\alpha/2)}. \tag{3.34}$$

La figure 3.5 compare le calcul exact de $J(\alpha)$ avec le développement (3.32) pour différentes températures. On constate que l'accord est très bon jusqu'à des températures appréciablement élevées. Le comportement de $J(\alpha)$, comme on le voit sur la figure 3.5 et sur les expressions limites (3.33) et (3.34), est assez remarquable. Pour la plupart des angles, J est négatif et tend même vers des valeurs fortement négatives pour de petits angles α. Cependant, pour $\alpha = 0$, J est au contraire positif et très grand comme le prédit l'expression asymptotique (3.33). Si l'on augmente l'angle α légèrement depuis $\alpha = 0$, J commence par augmenter fortement avant de chuter brutalement vers des valeurs très négatives, c'est-à-dire vers le comportement asymptotique (3.34). Le maximum de J est atteint pour $a \simeq \beta^2/2$ et prend des valeurs encore plus divergentes que $J(0)$, de l'ordre de $J(\alpha) = \pi/(32\bar{\mu}^2)t^{-3/2}(\ln(\pi/2t))^{-1/2}$.

J est donc séparée entre une partie à petits angles très fortement répulsive et une partie légèrement attractive aux angles plus grands. Les très petits angles ne vont donc pas être favorables car ils donnent une contribution large et positive à

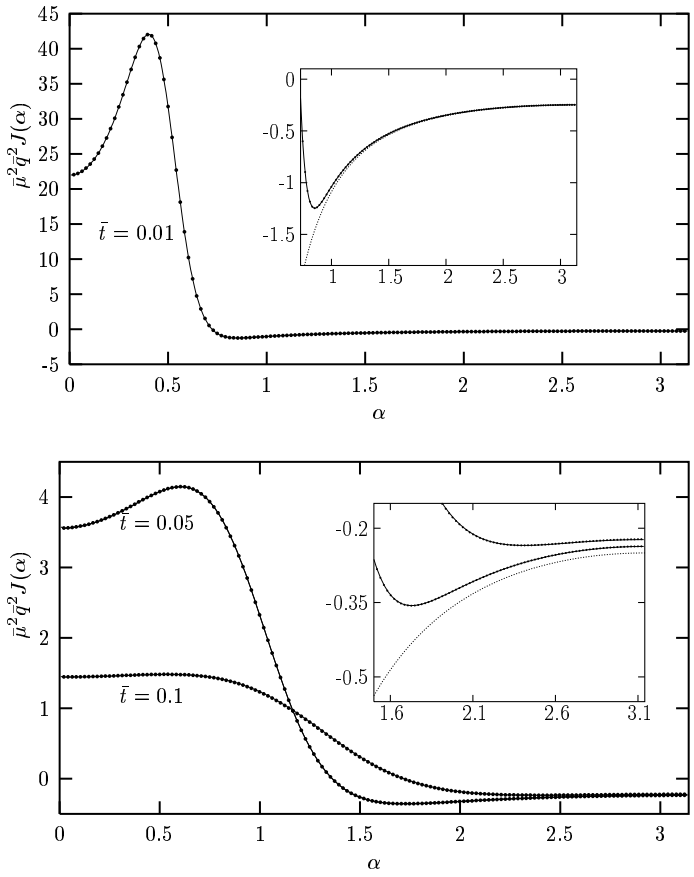


FIG. 3.5: $J(\alpha)$ est présenté pour différentes valeurs de la température réduite $\bar{t} = T/\bar{q}\bar{\mu}$ (0.01, 0.05 et 0.1). Les lignes pleines sont calculées à partir de nos développements à basse température (3.28) et (3.32), les points sont le résultat d'un calcul exact. La courbe asymptotique $-1/4\sin^2(\alpha/2)$ est quant à elle représentée en pointillée.

l'énergie. Ceci va imposer notamment un angle minimum entre vecteurs d'ondes. Il est intéressant de remarquer que la forme de J est très semblable à celle qu'on obtient à 3D, voir figure 2.3. La différence principale tient à ce que la limite entre les parties attractive et répulsive est fixe à 3D (et donnée par $\alpha = 67°$) alors qu'à 2D, cette limite, environ donnée par $a \simeq \beta^2/2$, tend vers 0 avec la température. Nous verrons dans la section 3.3 comment expliquer cette différence de comportement.

Calcul de $\tilde{J}(\alpha)$

Les calculs relatifs à $\tilde{J}(\alpha)$ sont très semblables à ceux de $J(\alpha)$ (voir annexe B). On écrit $\tilde{J}(\alpha)$ sous la forme $\tilde{J}(\alpha) = \tilde{J}_o(\alpha) + \tilde{J}_o(\pi - \alpha)$ avec, sans aucune

approximation :

$$8\bar{\mu}^2\bar{q}^2\tilde{J}_o(\alpha) = -\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} dY\ \tanh((\bar{q}Y-1)/2t)\frac{1}{\sqrt{Y^2-1}}\frac{1}{Y^2-\cos^2(\alpha/2)}. \quad (3.35)$$

Les contributions à la partie réelle de cette intégrale proviennent des domaines $Y > 1$ et $Y < -1$ ainsi que des pôles $Y = \pm\cos(\alpha/2) = \pm Y_1$. On remplace $\tanh((\bar{q}Y-1)/2t)$ par -1 pour $Y < 1$ et pour le pôle $Y = -Y_1$, les termes négligés étant exponentiellement petits. Les différentes contributions peuvent se récrire sous la forme :

$$8\bar{\mu}^2\bar{q}^2\tilde{J}_o(\alpha) = \frac{\pi}{\sin\alpha}\tanh((\bar{q}Y_1-1)/2t)+\int_1^{\infty} dY\frac{1-\tanh((\bar{q}Y-1)/2t)}{(Y^2-\cos^2(\alpha/2))\sqrt{Y^2-1}}+\frac{2\alpha-\pi}{\sin\alpha}. \quad (3.36)$$

Notons que l'intégrale sans le terme en tangente hyperbolique peut se calculer analytiquement et donne $(\pi-\alpha)/\sin(\alpha)$. Dans cette dernière expression, on constate que seules les valeurs de Y proches de 1 contribuent à l'intégrale car le terme en $1-\tanh((\bar{q}Y-1)/2t)$ décroît exponentiellement quand on s'éloigne de cette valeur. Comme $(\bar{q}Y-1)/2t > (\bar{q}-1)/2t = a \to +\infty$, on va pouvoir développer la tangente hyperbolique en exponentielles et calculer ainsi les corrections en températures de façon analytique.

On ajoute les contributions de $\tilde{J}_o(\alpha)$ et $\tilde{J}_o(\pi-\alpha)$ (en particulier, le dernier terme de (3.36) disparaît) et on développe l'intégrale apparaissant dans $\tilde{J}_o(\pi-\alpha)$ en fonction de $\bar{t}$, l'ordre le plus bas étant $2\bar{t}/\cos^2(\alpha/2)$. Ceci conduit à

$$8\bar{\mu}^2\bar{q}^2\tilde{J}(\alpha) = \bar{t}^{-1/2}\int_0^{\infty} du\frac{1-\tanh(u^2+a)}{(1+\cos(\alpha/2)+2\bar{t}u^2)(u^2+\bar{\beta}^2/2)\sqrt{1+\bar{t}u^2}} - \frac{\pi}{\sin\alpha}(1-\tanh(a-\bar{\beta}^2/2))+\frac{2\bar{t}}{\cos^2(\alpha/2)}. \quad (3.37)$$

Cette expression a été calculée pour $0 < \alpha < \pi/2$, le reste de la courbe étant déterminée par la symétrie $\tilde{J}(\pi-\alpha) = \tilde{J}(\alpha)$. Notons qu'on peut encore développer l'intégrale de l'expression (3.37) en fonction de $\bar{t}$ en remplaçant dans les termes correctifs a par $a_0 = \ln(\pi/2\bar{t})/4$.

On peut encore ici donner les cas limites.

- Pour $\alpha \to 0$, les divergences des premiers et second termes de l'expression (3.37) se compensent, le troisième et dernier terme étant simplement une correction en température. Une fois cette divergence soustraite de l'intégrale, on peut remplacer $1-\tanh Z$ par $2\exp(-2Z)$ et a par a_0 afin de calculer l'intégrale. Le résultat à l'ordre le plus bas en température est :

$$\tilde{J}(0) = -\frac{1}{4\mu^2}. \quad (3.38)$$

  L'identité $\tilde{J}(0) = J(\pi)$ permet de retrouver cette expression à partir de l'expression asymptotique (3.34).
- Pour α fixé et $\bar{t} \to 0$, le deuxième terme de (3.37) est exponentiellement petit. L'intégrale peut se calculer à l'ordre le plus bas en $\bar{t}$ ce qui donne :

$$\tilde{J}(\alpha) = -\frac{\pi}{4\mu^2}\frac{1}{\sin\alpha}. \quad (3.39)$$

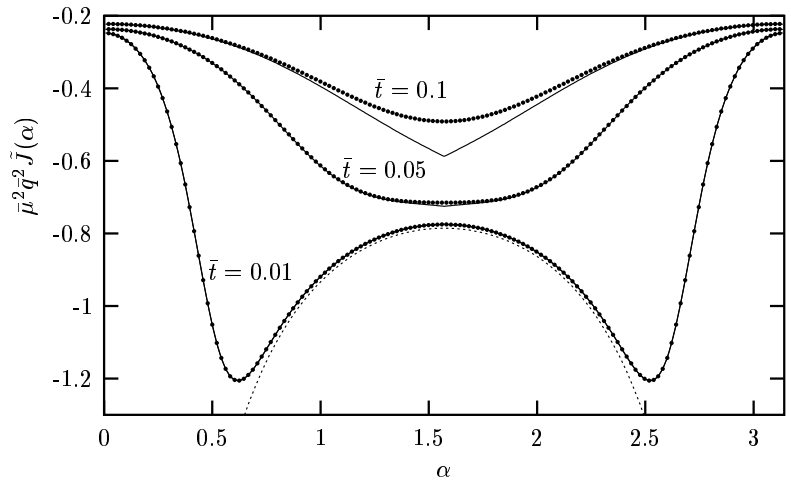


FIG. 3.6: $\tilde{J}(\alpha)$ est représentée pour différentes valeurs de la température réduite $\bar{t} = T/\bar{q}\bar{\mu}$ (0.01, 0.05 et 0.1). Les lignes pleines sont obtenues à partir de nos expressions basses températures (3.28) et (3.37) tandis que les points sont déterminés à partir d'un calcul numérique exact. La ligne en pointillée représente la limite asymptotique : $-\pi/4\sin(\alpha)$.

La figure 3.6 compare notre développement basse température (3.37) avec le calcul exact de $\tilde{J}(\alpha)$, ceci pour différentes températures. On constate que l'accord est très bon entre les deux calculs, des différences appréciables apparaissant au dessus de $\bar{t} \simeq 0.05$. La forme de $\tilde{J}(\alpha)$ est moins singulière que celle de $J(\alpha)$ à très basse température. On voit sur la figure 3.6 que $\tilde{J}$ est toujours négatif ce qui favorise les structures où les vecteurs d'onde vont par paires de vecteurs opposés [2]. A l'instar de J, on peut séparer le comportement de $\tilde{J}$ en deux domaines. Pour de grands angles, $\tilde{J}$ tend asymptotiquement vers la forme (3.39) qui peut elle-même tendre vers des valeurs très négatives pour α petit. Cependant le comportement de $\tilde{J}$ est différent aux petits angles, en dessous d'un angle critique noté $\tilde{\alpha}_c$ donnant le minimum de $\tilde{J}(\alpha)$, la pente change brutalement de signe et $\tilde{J}$ remonte et tend vers une valeur finie (3.38) pour $\alpha = 0$.

3.2.3 Arguments simples expliquant la cascade

Utilisant les caractéristiques des termes d'interaction $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$, nous allons maintenant expliquer brièvement les raisons pour lesquelles on a une cascade de transitions lorsque la température tend vers zéro.

Tout d'abord, sachant que les valeurs prises par $\tilde{J}$ sont globalement plus petites que celles prises par J, comme on peut le voir en comparant les expressions limites (3.33), (3.34), (3.38) et (3.39), on va négliger $\tilde{J}$ en première approximation. On revient ensuite sur la forme de $J(\alpha)$ et on désigne par α_0 l'angle qui annule la fonction J, séparant la partie fortement répulsive de la partie attractive. D'un

[2] c'est une condition nécessaire pour que $\tilde{J}(\alpha)$ intervienne dans le calcul de l'énergie libre, voir l'équation (2.62).

point de vue énergétique, tout angle choisi dans le domaine $0 < \alpha < \alpha_0$ est très défavorable car il donne une contribution fortement positive à l'énergie libre. On a ainsi une région angulaire interdite et les vecteurs d'onde pris deux à deux doivent être espacés d'un angle α au moins égal à α_0. D'un autre côté, la situation la plus favorable est celle ou α est proche de l'angle qui minimise $J(\alpha)$, qu'on note α_c, et α_c est lui-même proche de α_0.

Par ailleurs, on voit dans l'équation (2.62) que $J(0)$, qui diverge à basse température, selon l'expression asymptotique (3.33), apparaît N fois dans le terme d'ordre 4 en Δ de l'énergie libre. Cet effet très défavorable peut être atténué si l'on prend un grand nombre de vecteurs d'onde N, puisque le nombre total de termes dans l'expression (2.62) croît comme N^2. Les contraintes pour minimiser l'énergie sont donc d'avoir le nombre maximum possible de vecteurs d'onde avec un angle minimal α_0 les séparant deux à deux. Pour la structure ayant la plus basse énergie, on s'attend donc à ce que les vecteurs d'onde forment une structure symétrique où ils sont régulièrement espacés, l'angle commun de séparation $2\pi/N$ étant compris entre α_0 et α_c. La cascade apparaît naturellement quand on diminue la température car α_0 et α_c diminuent aussi et la structure optimale voit son nombre d'ondes planes N augmenter. On obtient une cascade de transitions entre différentes structures du paramètre d'ordre pour laquelle la limite $T = 0$ est singulière. Dans la suite, nous allons étudier cette cascade de façon plus précise.

3.2.4 Minimisation de l'énergie

Énergie libre simplifiée

On commence pour simplifier par négliger $\tilde{J}$ dans l'expression de l'énergie libre. On obtient :

$$\Omega_a = \sum_{\mathbf{q}} \Omega_2(q, \bar{\mu}, T)|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(2 - \delta_{\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j})|\Delta_{\mathbf{q}_i}|^2|\Delta_{\mathbf{q}_j}|^2 J(\alpha_{\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j}) \qquad (3.40)$$

Il est intéressant de noter que la minimisation directe de cette expression sans hypothèse est *a priori* un problème difficile. Néanmoins après les considérations générales du paragraphe précédent, il semble naturel dans notre cas de supposer que les vecteurs d'onde sont également répartis sur le cercle, la séparation entre plus proches voisins étant de $2\pi/N$. On note $\alpha_n = 2n\pi/N$ la position angulaire du $n^{\text{ième}}$ vecteur d'onde. Il est maintenant possible de montrer simplement que les poids $w_n = |\Delta_{\mathbf{q}_n}|^2$ des différents vecteurs d'onde sont égaux. Le terme d'ordre 4 de l'énergie est une forme quadratique dans les w_n que l'on peut diagonaliser, les modes propres étant de simples ondes planes. La minimisation de l'énergie revient alors à se restreindre au mode fondamental pour lequel les poids w_n sont égaux. Ce raisonnement est détaillé dans l'**encadré** 4.

Inversement, si on suppose que les poids w_n sont égaux et que les angles entre vecteurs d'onde sont libres, la minimisation de l'énergie est analogue à la recherche du fondamental d'un ensemble d'atomes sur un cercle où l'interaction entre atomes est répulsive à courte portée et attractive à longue portée. Dans ce cas, on s'attend à ce que l'équilibre du système corresponde à une structure symétrique où les atomes sont régulièrement espacés.

Encadré 4 : Structures symétriques

On suppose que le paramètre d'ordre est une somme d'ondes planes dont les vecteurs d'onde sont régulièrement répartis sur un cercle et qu'on désigne par leur position angulaire $\alpha_n = 2n\pi/N$, n variant de 0 à $N-1$. Les poids des ondes planes qui constituent le paramètre d'ordre sont notés $w_n = |\Delta_{\mathbf{q}_n}|^2$. Avec ces notations, l'énergie libre (3.40) est égale à :

$$\Omega_a = \Omega_2(q, \bar{\mu}, T)\sqrt{N}\ \mathbf{e_0}\cdot\mathbf{X} + {}^{\mathrm{t}}\mathbf{X}\mathbf{M}\mathbf{X}, \tag{B4-1}$$

où $\mathbf{e_0}$ est le vecteur normalisé $(1,1,...,1)/\sqrt{N}$, $\mathbf{X} = (w_0, w_1, \ldots, w_{N-1})$ et $\mathbf{M}$ est la matrice circulaire dont la première ligne est $(J(0)/2, J(\alpha_1), J(\alpha_2), ..., J(\alpha_{N-1}))$. On montre par ailleurs, à partir des relations $J(2\pi - \alpha) = J(\alpha)$ et $\alpha_{N-n} = 2\pi - \alpha_n$ que $\mathbf{M}$ est une matrice symétrique. Les N vecteurs propres normalisés de $\mathbf{M}$ sont donnés par :

$$\mathbf{e_k} = \sqrt{2 - \delta_{k,0} - \delta_{k,N/2}}\,(1, \cos\phi_k, \cos 2\phi_k, \ldots, \cos(N-1)\phi_k)/\sqrt{N} \tag{B4-2}$$

où $\phi_k = 2k\pi/N$ et $k = 0..N-1$, les valeurs propres correspondantes étant données par :

$$\lambda_k = J(0)/2 + \sum_{n=1}^{N-1} J(\alpha_n)\cos n\phi_k. \tag{B4-3}$$

Les différents $J(\alpha_n)$ sont négatifs pour $n \neq 0$ car les angles sont supérieurs à l'angle α_0. Par conséquent, λ_0, qui correspond au vecteur propre $\mathbf{e_0}$, est la plus petite des valeurs propres. On décompose $\mathbf{X}$ suivant la base orthogonale des $\{\mathbf{e_i}\}$: $\mathbf{X} = \sum_{n=0}^{N-1} x_k \mathbf{e_k}$ et l'énergie se récrit :

$$\Omega_a = \Omega_2(q, \bar{\mu}, T)\sqrt{N}x_0 + \sum_{n=0}^{N-1} x_k^2 \lambda_k. \tag{B4-4}$$

Sa minimisation, lorsque $\Omega_2(q, \bar{\mu}, T) < 0$, c'est-à-dire lorsqu'on est à l'intérieur de la phase condensée, donne :

$$x_k = 0 \qquad \text{pour} \qquad k \neq 0, \tag{B4-5}$$

$$x_0 = -\frac{\Omega_2(q, \bar{\mu}, T)\sqrt{N}}{2\lambda_0}, \tag{B4-6}$$

avec $\lambda_0 > 0$ (c'est la condition pour avoir une transition du second ordre). La configuration d'énergie minimale est donc une somme d'ondes planes dont les poids sont égaux en module, les phases étant libres. L'énergie minimisée est alors :

$$\Omega_a = -\frac{N\Omega_2(q, \bar{\mu}, T)^2}{2J(0) + 4\sum_{n\neq 0} J(\alpha_n)}. \tag{B4-7}$$

En conclusion, la structure qui minimise l'énergie à N fixé est totalement symétrique, avec des poids w_n égaux et des vecteurs d'onde régulièrement espacés. On peut alors minimiser l'énergie libre (3.40) par rapport aux poids w_n et on obtient :

$$\Omega_a = -\frac{\Omega_2(q,\bar{\mu},T)^2}{G_2(N)} \tag{3.41}$$

avec

$$NG_2(N) = 2J(0) + 4\sum_{n=1}^{N-1} J(\alpha_n). \tag{3.42}$$

Néanmoins, l'égalité des poids n'implique pas l'égalité des phases des ondes planes, celles-ci étant libres.

Ajout des termes en $\tilde{J}(\alpha)$

On peut maintenant affiner l'étude du minimum en ajoutant les termes en $\tilde{J}(\alpha)$ dans l'énergie. Ces termes n'apparaissent cependant que si les vecteurs d'onde sont présents par couples de vecteurs opposés ($\mathbf{q}$,$-\mathbf{q}$), $\tilde{J}(\alpha)$ étant une interaction entre deux couples de vecteurs opposés. Dans le cadre de notre hypothèse où les vecteurs d'onde sont régulièrement espacés, on a des vecteurs opposés pour N pair, auquel cas on a $N/2$ paires, mais pas pour N impair. Dans ce dernier cas, l'énergie libre est simplement Ω_a donnée par (3.40). Cet effet tend à favoriser les structures de N pair puisque $\tilde{J}(\alpha)$ est une fonction négative. On reprend notre hypothèse de vecteurs d'onde régulièrement espacés, l'énergie est maintenant donnée par :

$$\Omega = \Omega_a + 2\sum_{n=0}^{N/2-1}\sum_{m=0}^{N/2-1}(1-\delta_{n,m})\Delta_n\Delta_{-n}\Delta_m^*\Delta_{-m}^*\tilde{J}(\alpha_{n-m}), \tag{3.43}$$

où Δ_n est une notation simplifiée pour $\Delta_{\mathbf{q}_n}$. Si l'on veut minimiser l'énergie, les termes $\Delta_n\Delta_{-n}\Delta_m^*\Delta_{-m}^*$ doivent toujours être réels et positifs puisque $\tilde{J}(\alpha)$ est toujours négatif. Cette condition implique une restriction sur le choix des phases. Si on définit $\Delta_n = |\Delta_n|e^{i\phi_n}$, alors $\phi_n + \phi_{-n} = \Phi_0$ pour tout n, Φ_0 est une phase quelconque qu'on peut choisir égale à zéro par un changement global de la phase du paramètre d'ordre. On a alors $\phi_n = -\phi_{-n}$ ce qui laisse tout de même une liberté dans le choix des phases ϕ_n.

Par ailleurs, on peut voir dans l'équation (3.43) que la contribution des termes en $\tilde{J}(\alpha)$ est une forme quadratique dans les poids $w'_n = \Delta_n\Delta_{-n}$ dont les modes propres sont aussi des ondes planes et dont le minimum est aussi donné par une distribution uniforme conduisant à des poids $|\Delta_n|$ tous égaux. En conclusion, l'inclusion des termes en $\tilde{J}(\alpha)$ ne modifie pas les structures optimales. Lorsque N est pair, le paramètre d'ordre prend la forme suivante :

$$\Delta(\mathbf{r}) = |\Delta_1|\sum_{\mathbf{q}_j}\cos(\mathbf{q}_j\cdot\mathbf{r}+\phi_j), \tag{3.44}$$

et on retrouve les formes symétriques optimales du voisinage du point tricritique. Une différence notable par rapport à l'étude du voisinage du point tricritique est

l'apparition d'interactions effectives entre les directions des vecteurs d'onde qui stabilisent le système dans des configurations symétriques où les vecteurs d'onde sont régulièrement espacés. Cet effet n'est pas du tout présent au voisinage du point tricritique où les directions des vecteurs d'onde n'interviennent pas dans l'énergie.

En conclusion, l'énergie libre minimisée des structures à N impair est toujours donnée par les expressions (3.41) et (3.42). Pour N pair, l'équation (3.41) est aussi valable et l'équation (3.42) est remplacée par :

$$NG_2(N) = 2J(0) + 4\sum_{n=1}^{N-1} J(\alpha_n) + 4\sum_{n=1}^{N/2-1} \tilde{J}(\alpha_n). \tag{3.45}$$

Comparaison des structures à différents N

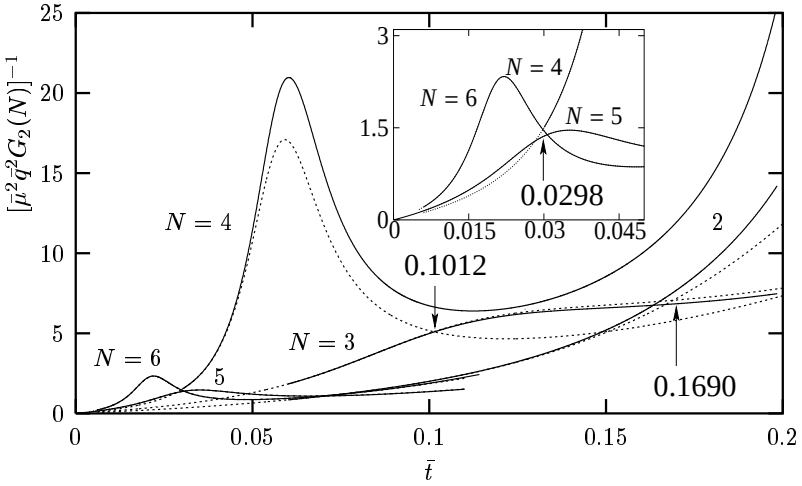


FIG. 3.7: $1/G_2$ est tracé pour différentes valeurs de N en fonction de la température réduite $\bar{t} = T/\bar{q}\bar{\mu}$. Les lignes pleines sont calculées à partir des développements basse température (3.28), (3.32) et (3.36), les lignes en pointillés étant les résultats exacts. L'accord est très bon dans le domaine $\bar{t} \leq 0.05$. Contrairement à la structure $N = 3$ qui possède un domaine où elle est favorisée, la structure impaire $N = 5$ est toujours défavorisée par rapport aux structures avec N pair.

On cherche maintenant la valeur optimale de N en fonction de la température. Pour cela, on souhaite minimiser l'énergie (3.41) ce qui revient à maximiser $1/G_2(N)$. On peut calculer $1/G_2(N)$ à partir des expressions (3.42) et (3.45), soit numériquement et de façon exacte, soit en utilisant nos développements basse température pour a (3.28), $J(\alpha)$ (3.32) et $\tilde{J}(\alpha)$ (3.36). La comparaison est présentée figure 3.7 en fonction de la température réduite $\bar{t}$. On constate un très bon accord pour des température inférieures à $\bar{t} \simeq 0.05$, température en dessous de laquelle nos développements sont largement suffisant pour décrire la cascade.

On présente figure 3.8 la cascade à plus basse température où les calculs sont effectués en utilisant nos développements basse température. Le résultat est celui

attendu, à savoir que la structure optimale du paramètre d'ordre augmente indéfiniment son nombre de vecteurs d'onde N à mesure que la température tend vers zéro. Les transformations d'une structure à une autre ne sont pas continues si bien que les transitions correspondantes sont du premier ordre légèrement à l'intérieur de la phase condensée. On constate par ailleurs qu'à part pour $N = 3$, les structures à N impair ne sont jamais favorisées. La compétition entre la maximisation de N - un angle minimum étant imposé - et l'effet favorable d'un N pair dû aux termes en $\tilde{J}(\alpha)$ est toujours à l'avantage des structures de la forme (3.44) avec N pair, lorsqu'on se place à basse température.

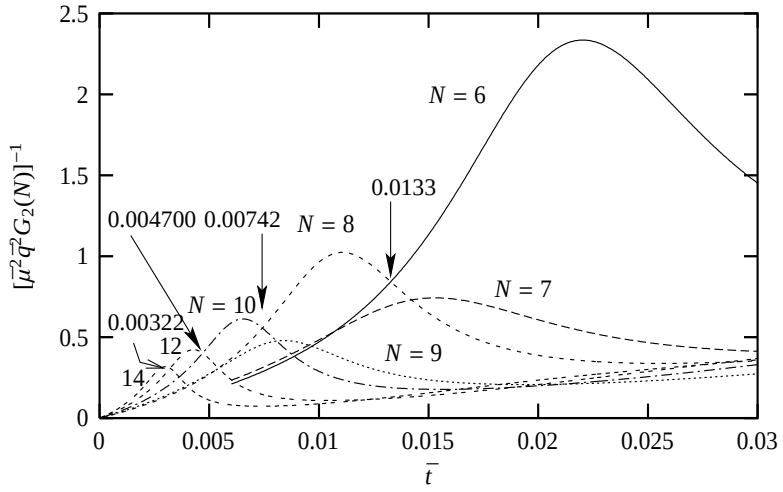


FIG. 3.8: $1/G_2$ est représentée pour différents N à plus basse température $\bar{t}$ en utilisant les développements (3.28), (3.32) et (3.36). La cascade est clairement apparente. Pour chaque valeur de la température $\bar{t}$, la structure la plus stable est celle pour laquelle $\left[\bar{\mu}^2\bar{q}^2G_2(N)\right]^{-1}$ est maximum. On omet les structures $N = 11$ et $N = 13$ qui ne sont jamais les plus stables.

3.2.5 Comportements asymptotiques

Afin d'étudier la cascade plus en détail dans le régime des très basses températures, on est amené à dériver des expressions analytiques asymptotiques pour $\bar{t} \ll 1$. Nous allons chercher plus précisément les positions des angles α_0, donnant le zéro de J, α_c donnant le minimum de J. Nous pourrons ensuite en tirer des conclusions sur l'ordre de la transition ainsi que sur la comparaison entre les structures de N pair et impair.

Angles particuliers

La connaissance des angles α_0 et α_c est fondamentale pour étudier la cascade puisqu'ils donnent l'écart angulaire entre vecteurs d'onde. $J(\alpha)$ est maximum pour $a \simeq \beta^2/2$, son minimum étant pour un angle légèrement supérieur. Pour $\bar{t} \to 0$, $\beta^2/2 \simeq a \simeq a_0 \simeq \ln(\pi/2\bar{t})/4$ implique $\alpha \simeq 2\sqrt{\bar{t}\ln(\pi/2\bar{t})}$. Le domaine dans lequel

sont les angles α_0 et α_c est donc celui où $\alpha \to 0$ mais avec $\beta^2/2 \simeq \alpha^2/16t \to +\infty$. Dans ce régime, $J(\alpha)$ prend une forme plus simple :

$$\bar{\mu}^2 J(\alpha) \simeq -\frac{1}{\alpha^2} + \frac{\pi}{16t\alpha \cosh^2(x - a_0)}, \tag{3.46}$$

avec $x \equiv \beta^2/2 = \alpha^2/16t$. Les premier et second termes de cette expression proviennent des premier et second termes de l'expression (3.32). On décrit ainsi bien la partie de $J(\alpha)$ proche du minimum, le terme en $-1/\alpha^2$ domine pour les grands angles tandis que l'autre terme domine pour les petits angles, les deux termes étant du même ordre au voisinage du zéro et du minimum de J. L'extremisation de l'expression (3.46) donne une équation sur la position du minimum :

$$\cosh^2(x - a_0) = \frac{\pi}{2}\frac{x^{3/2}}{t^{1/2}}\left(\tanh(x - a_0) + \frac{4}{x}\right). \tag{3.47}$$

Il y a plusieurs solutions à cette équation mais le minimum que nous cherchons est pour une grande valeur de $x - a_0 > 0$. Cette hypothèse permet de simplifier l'équation (3.47) en :

$$e^x = kx^{3/4}, \tag{3.48}$$

où l'on a posé $k = (2\pi^3/t^2)^{1/4}$. La solution de cette équation transcendante conduit à la valeur asymptotique de l'angle α_c. On peut obtenir cette solution en construisant une suite définie par la relation de récurrence $x_{n+1} = \ln k + (3/4)\ln x_n$. Celle-ci converge rapidement vers la solution de l'équation (3.48), la convergence ralentissant lorsque k augmente significativement. L'ordre dominant pour le calcul de α_c est $x = \ln k$ ce qui conduit à :

$$\alpha_c = \left(8t \ln \frac{(2\pi^3)^{1/2}}{t}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{3.49}$$

On peut appliquer la même procédure pour déterminer la valeur asymptotique de l'angle α_0 qui annule $J(\alpha)$. On prend l'expression (3.46) égale à zéro ce qui donne :

$$\cosh^2(x - a_0) = \frac{\pi\alpha}{16t}. \tag{3.50}$$

On suppose ici aussi qu'on est dans le domaine où $x - a_0$ est large et positif ce qui simplifie l'équation en une autre équation transcendante :

$$e^x = \frac{k}{\sqrt{2}}x^{1/4}. \tag{3.51}$$

La relation de récurrence $x_{n+1} = \ln(k/\sqrt{2}) + (1/4)\ln x_n$ peut être utilisée pour déterminer la solution de cette équation. L'ordre dominant est $x = \ln(k/\sqrt{2})$ ce qui donne :

$$\alpha_0 = \left(8t \ln \frac{(2\pi^3)^{1/2}}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{3.52}$$

La minimisation de l'énergie nous conduit à choisir N le plus grand possible tout en évitant les angles inférieurs à α_0 qui donnent une contribution énergétique largement défavorable. La séparation angulaire $2\pi/N$ optimale entre ondes planes doit donc rester supérieure à α_0 et proche de α_c où les contributions à l'énergie sont les plus favorables. La valeur optimale de N est par conséquent quelque part entre les parties entières de $2\pi/\alpha_c$ et $2\pi/\alpha_0$, elles-mêmes très proches. On obtient par ailleurs par le calcul de $1/G_2(N)$ les positions des transitions entre les structures de N différents comme on le voit sur les figures 3.7 et 3.8. La valeur, pour chaque transition, du N optimal avant et après la transition est comparée aux calculs exacts de $2\pi/\alpha_c$ et $2\pi/\alpha_0$ sur la figure 3.9. Dans le domaine des basses températures, on constate que le N optimal est bien situé entre les courbes $2\pi/\alpha_c$ et $2\pi/\alpha_0$.

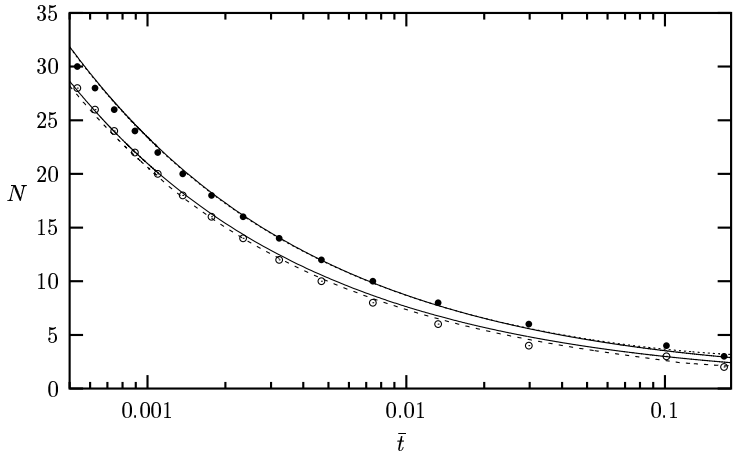


FIG. 3.9: Valeur optimale de N en fonction de la température. Les points désignent les positions des transitions entre structures de N différents. Les blancs donnent la valeur optimale de N au-dessus de la température de transition, les noirs en dessous. On constate que N est toujours pair sauf pour $N = 3$. Les lignes en pointillés donnent le calcul exact des quantités $2\pi/\alpha_c$ et $2\pi/\alpha_0$, $2\pi/\alpha_0$ étant toujours supérieure à $2\pi/\alpha_c$. Les lignes pleines sont calculées à partir des formules de récurrence avec seulement une itération. L'accord avec le calcul exact est déjà excellent dans ce régime de températures.

Calcul asymptotique pour $G_2(N)$

Pour des angles supérieurs à α_c, J tend très vite vers son comportement limite (3.34) comme on le voit sur la figure 3.5. On va ainsi faire l'approximation pour le calcul de $G_2(N)$ à très basse température que $J(\alpha)$ est égal à l'expression asymptotique (3.34) pour les angles non nuls, $J(0)$ étant lui donné par (3.33). Dans ce cas, la somme sur les angles dans $G_2(N)$ est dominée par les petits angles pour lesquels $\sin(\alpha/2) \simeq \alpha/2$, d'où :

$$\frac{4}{N}\sum_{n=1}^{N-1}\bar{\mu}^2 J(\frac{2\pi n}{N}) \simeq -\frac{8}{N}\sum_{n=1}^{N/2-1}\frac{1}{4(n\pi/N)^2} = -\frac{N}{3} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right). \qquad (3.53)$$

Pour N pair, il faut inclure dans le calcul de $G_2(N)$ les termes en $\tilde{J}(\alpha)$ qu'on calcule en utilisant la formule asymptotique (3.39). La justification de cette approximation tient au fait que l'angle $\tilde{\alpha}_c$ au-dessus duquel la forme (3.39) est valable est toujours inférieur à α_c. Les termes dominants proviennent ici aussi des petits angles :

$$\frac{4}{N}\sum_{n=1}^{N/2-1}\bar{\mu}^2\tilde{J}(\frac{2\pi n}{N}) \simeq -\frac{2\pi}{N}\sum_{n=2}^{N/4}\frac{1}{2\pi n/N} = -\ln N + \mathcal{O}(1), \tag{3.54}$$

ce qui donne une correction logarithmique en N pour les structures de N pair. Les résultats pour $G_2(N)$ sont finalement :

$$\bar{\mu}^2 G_2(N) \simeq \frac{1}{2Nt} - \frac{N}{3} \qquad \text{pour } N \text{ impair} \tag{3.55}$$

$$\bar{\mu}^2 G_2(N) \simeq \frac{1}{2Nt} - \frac{N}{3} - \ln N + cte \qquad \text{pour } N \text{ pair} \tag{3.56}$$

Ces expressions sont valables pour la partie croissante de $G_2(N)$ à basse température qu'on peut voir sur les figures 3.7 et 3.8 mais elles ne permettent pas de décrire la rupture de pente qui apparaît à plus haute température. Pour décrire ce changement de pente, il faut inclure dans la sommation des angles inférieurs à α_c pour lesquels il n'y a pas de formule simplement sommable pour $J(\alpha)$.

Si l'on remplace N par son expression optimale $2\pi/\alpha_c$, on obtient :

$$\bar{\mu}^2 G_2(N) = \frac{\alpha_c}{4\pi t}\left(1 - \frac{8\pi^2 t}{3\alpha_c^2}\right) + \mathcal{O}(\ln(1/t)). \tag{3.57}$$

Comme $8t/\alpha_c^2 \sim 1/\ln(1/t)$ d'après l'expression (3.49), on en déduit que $G_2(N)$ reste toujours positif. La transition reste donc toujours du second ordre ce qui valide notre hypothèse initiale.

On confirme par ailleurs que les contributions à $G_2(N)$ provenant des termes en $J(\alpha)$ dominent les contributions des termes en $\tilde{J}(\alpha)$. Cependant, si l'on veut comparer N impair à $N-1$ pair, on écrit :

$$\bar{\mu}^2[G_2(N-1) - G_2(N)] = \frac{1}{2N(N-1)t} - \ln(N-1) + \mathcal{O}(1), \tag{3.58}$$

qui peut se calculer pour $N = 2\pi/\alpha_c$ et conduit, à partir de l'équation (3.48), à :

$$\bar{\mu}^2[G_2(N-1) - G_2(N)] = -x(1 - \frac{2}{\pi^2}) + \frac{5}{4}\ln x + \frac{1}{4}\ln\frac{32}{\pi}. \tag{3.59}$$

Cette dernière expression est toujours négative puisque son maximum, obtenu pour $1/x_{\rm m} = (4/5)(1-2/\pi^2)$, est égal à -0.107. On confirme ici encore que les structures à N pair sont favorisées à basse température sur les structures à N impair grâce à la présence des termes en $\tilde{J}(\alpha)$.

3.2.6 Conclusions

Nous avons donc étudié en détail le voisinage de la transition FFLO du second ordre à 2D. La position de cette transition dans le plan ($\bar{\mu}$,T) est calculée dans

le chapitre 1 à partir de l'instabilité de l'état normal. Nous nous sommes donc placés légèrement à l'intérieur de la phase condensée afin de déterminer la structure du paramètre d'ordre qui minimise l'énergie libre. Pour ce faire, nous avons développé l'énergie en fonction du paramètre d'ordre dans l'esprit d'une approche à la Ginzburg-Landau. L'ordre 2 donne la position de la transition FFLO ainsi que la norme optimale du vecteur d'onde. L'ordre 4 du développement permet de distinguer énergétiquement les différentes structures du paramètre d'ordre.

Nous avons effectué une analyse précise de ces deux termes en dérivant notamment leur développement analytique basse température. Dans ce domaine légèrement à l'intérieur de la phase condensée, nous avons ainsi pu mettre en évidence la présence d'une cascade de transitions du premier ordre à 2D entre des structures du paramètre d'ordre de plus en plus complexes. Nous avons identifié le lien qui existe entre cette cascade et la non analyticité de l'énergie libre à température nulle. Nos expressions analytiques, qui se sont révélées efficaces quantitativement jusqu'à des températures relativement appréciables, nous ont finalement permis tout d'abord de vérifier que la transition reste du second ordre à très basse température, puis de caractériser la forme générale des structures du paramètre d'ordre qui minimise l'énergie. Cette forme générale est une somme réelle de cosinus dont le nombre croît indéfiniment lorsque la température tend vers zéro.

Dans la pratique, différents effets physiques peuvent modifier ou limiter cette cascade de transitions. L'incertitude sur la norme des vecteurs d'onde due aux impuretés (voir la sous-section 1.2.1) moyenne les effets de la non analyticité de l'énergie. On peut ainsi associer une température effective aux impuretés qui ont pour effet de stopper la cascade pour cette température. De même, une légère anisotropie dans la forme de la surface de Fermi réduit les effets des singularités de l'énergie et peut modifier la structure de la cascade.

3.3 Appariements indépendants

Jusqu'à maintenant, nous avons utilisé le formalisme des équations de Gorkov (2.43) afin de décrire les situations physiques d'apparition des phases FFLO à deux et trois dimensions. Ce formalisme BCS est très puissant car il permet de calculer les fonctions de corrélation sans avoir accès explicitement aux fonctions d'onde à N corps caractérisant l'état du système. On peut ainsi calculer la plupart des observables physiques et faire des prédictions.

Cependant, l'interprétation physique des résultats est parfois obscure et la connaissance de la forme de la fonction d'onde à N corps des fermions est un atout supplémentaire dans la compréhension générale de la physique sous-jacente. A température nulle notamment, il s'agit tout simplement de déterminer l'état fondamental du système. Le travail remarquable de Fulde et Ferrell, dans leur article [2] de 1964, a été de construire plus explicitement cette fonction d'onde à N corps dans le cas le plus simple où le paramètre d'ordre est une onde plane. Depuis, ce travail n'a pas été étendu à des formes du paramètre d'ordre plus complexes. Notre ambition ici n'est pas de combler cette lacune mais plus modestement d'essayer de faire le lien entre nos résultats et le concept d'interaction entre anneaux d'appariement tel qu'il apparaît dans le travail de Bowers et Rajagopal [72]. On revient en premier lieu sur les résultats de Fulde et Ferrell pour l'onde plane.

3.3.1 Forme de l'appariement pour l'onde plane de Fulde-Ferrell

Reprenons l'argument énergétique vu au 1.4.2 pour expliquer l'apparition des phases FFLO. La différence de potentiel chimique $2\bar{\mu}$ tend à polariser le milieu tandis que l'appariement en paires de Cooper donne par construction une polarisation totale nulle, chaque spin $\uparrow$ étant lié à un spin $\downarrow$. Cette contradiction qui augmente avec $\bar{\mu}$ explique la transition brutale du premier ordre correspondant à la limite de Clogston-Chandrasekhar.

Le principe physique des phases FFLO est de former des paires de Cooper de moment total non nul $\mathbf{q} \neq 0$. Dans l'état de Fulde-Ferrell, toutes les paires de Cooper ont le même moment $\mathbf{q}$. Il se trouve que si l'on souhaite minimiser l'énergie dans ce processus de formation de paires de Cooper, il faut en même temps briser des paires. Il y a en effet plusieurs conséquences à cette brisure de paires.

- Tout d'abord, les paires brisées donnent des fermions non liés qui peuvent être polarisés. Ce faisant, on relâche légèrement la contrainte sur la polarisation.
- Ensuite, les paires de Cooper ayant toutes le même moment total, on obtient un courant superfluide permanent. Fulde et Ferrell ont montré que ce courant est en fait exactement compensé par un courant opposé créé par les fermions libres provenant des paires brisées. Les conditions d'annulation du courant total et de minimisation de l'énergie sont en fait équivalentes conformément au théorème de Bloch.

D'un autre côté la brisure de paires va diminuer l'énergie de condensation et en particulier l'amplitude du paramètre d'ordre. On reprend l'étude BCS de la

sous-section 2.2.1 et on écrit l'équation du gap pour l'onde plane de Fulde-Ferrell $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$:

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) = \frac{2}{N_0}\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{E_\mathbf{k}}\left(f_\uparrow + f_\downarrow\right) \tag{3.60}$$

avec $f_{\uparrow,\downarrow} = (1 + e^{\beta(E_\mathbf{k} \pm \bar{\mu}_\mathbf{k})})^{-1}$ et $\bar{\mu}_\mathbf{k} = \bar{\mu}(1 - \bar{q}\cos\theta)$, θ étant l'angle entre les directions de $\mathbf{q}$ et $\mathbf{k}$. Les énergies des quasiparticules sont donc données par $E_{\mathbf{k}\uparrow,\downarrow} = E_\mathbf{k} \mp \bar{\mu}_\mathbf{k}$. A température nulle, l'équation s'écrit :

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right) = \frac{1}{N_0}\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{E_\mathbf{k}}\left[\theta(-E_{\mathbf{k}\uparrow}) + \theta(-E_{\mathbf{k}\downarrow})\right]. \tag{3.61}$$

Fulde et Ferrell identifient dans cette équation les vecteurs d'onde contribuant à l'intégrale du terme de droite comme appartenant à des régions dites de blocage. Dans ces régions, les paires de Cooper sont brisées, c'est-à-dire que les vecteurs d'onde ne participent pas à l'appariement. La contribution des régions de blocage va donc diminuer l'amplitude Δ par rapport à la valeur Δ_0 lorsqu'il n'y a pas de blocage (état BCS). L'espace des vecteurs d'onde est finalement séparé en deux : les régions de blocage où, soit $E_{\mathbf{k}\uparrow} < 0$, soit $E_{\mathbf{k}\downarrow} < 0$, et le domaine complémentaire où il y a appariement des paires de Cooper.

On retrouve cette séparation en raisonnant directement sur la forme de la fonction d'onde du fondamental. L'hamiltonien effectif BCS est donné par :

$$h = \sum_\mathbf{k}\left[E_{\mathbf{k}\uparrow}\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k},\uparrow}\hat{b}_{\mathbf{k},\uparrow} + E_{\mathbf{k}\downarrow}\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k},\downarrow}\hat{b}_{\mathbf{k},\downarrow}\right] + cte \tag{3.62}$$

et son fondamental est le vide des opérateurs $\hat{b}_{\mathbf{k},\uparrow}$ et $\hat{b}_{\mathbf{k},\downarrow}$ sauf pour ceux dont les énergies d'excitation sont négatives. On peut ainsi écrire explicitement la forme du fondamental Fulde-Ferrell [80] :

$$\Phi_{\mathrm{FF}} = \prod_{E_{\mathbf{k}\,\sigma}<0} a^\dagger_{\sigma\mathbf{k}+\mathbf{q}/2\,\sigma} \prod_{E_{\mathbf{k}\,\sigma}>0}\left(u_\mathbf{k} + v_k\, a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2\uparrow}a^\dagger_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2\downarrow}\right) \tag{3.63}$$

où $a_{\mathbf{k}\,\sigma}$ est l'opérateur de destruction de l'onde plane de vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Ce fondamental est construit à partir de l'état BCS. On multiplie à gauche par les opérateurs $\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$, ce qui consiste à briser des paires, là où $E_{\mathbf{k}\,\sigma} < 0$. Par exemple, si $E_{\mathbf{k}\uparrow} < 0$ alors la paire $(\mathbf{k}+\mathbf{q}/2,\uparrow),(-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2,\downarrow)$ est brisée, on obtient un état fermionique $(\mathbf{k}+\mathbf{q}/2,\uparrow)$ occupé et un état $(-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2,\downarrow)$ vacant.

Revenons aux conditions qui définissent les régions de blocage. Celles-ci peuvent s'écrire : $E_\mathbf{k} < |\bar{\mu}_\mathbf{k}|$. Pour des vecteurs d'onde éloignés de la surface de Fermi, cette inégalité ne peut pas être vérifiée si bien qu'on est dans le domaine d'appariement. Toutefois, on sait que les vecteurs qui participent le plus activement à l'appariement sont ceux qui sont au voisinage de la surface de Fermi. Ceci est en fait lié au terme en $1/E_\mathbf{k}$ dans l'intégrale de l'équation (3.61). On va donc se placer exactement sur la surface de Fermi, où $\xi_\mathbf{k} = 0$ et où l'inégalité $E_\mathbf{k} < |\bar{\mu}_\mathbf{k}|$ donne :

$$|\Delta| < \bar{\mu}|1 - \bar{q}\cos\theta| \tag{3.64}$$

Lorsqu'on prend la limite $\Delta \to 0$, on constate que l'inégalité (3.64) est vérifiée partout sur la surface de Fermi sauf pour une région de taille infinitésimale où $\bar{\mu}_{\mathbf{k}} = 0$.

A trois dimensions, cette région est un cercle dont l'angle d'ouverture ψ_0 vu depuis l'origine est tel que $1-\bar{q}\cos(\psi_0/2) = 0$. Pour $\bar{q} = 1.1997$ (valeur optimale de $\bar{q}$ à température nulle à 3D), cela donne $\psi_0 \simeq 67.1°$. A deux dimensions, la région se réduit à deux points espacés angulairement de ψ_0 calculé comme à 3D. Si on reprend l'image des surfaces de Fermi translatées (voir figure 1.7), $\bar{\mu}_{\mathbf{k}}$ s'identifie à la demi-distance entre les surfaces de Fermi. Son annulation correspond par conséquent à l'intersection entre les deux surfaces de Fermi. A deux dimensions, la valeur optimale de $\bar{q}$ à température nulle est $\bar{q} = 1$. Dans ces conditions, les deux surfaces de Fermi sont juste en contact. Les points d'intersection se rejoignent pour n'en donner qu'un si bien que $\psi_0 = 0$.

On augmente maintenant légèrement Δ. A trois dimensions, le cercle s'épaissit et devient un anneau dont l'épaisseur est égal à 2Δ. A deux dimensions, les deux points grossissent et donnent des disques de rayon Δ. L'anneau plein ou les deux disques sont ainsi le lieu privilégié d'appariement des paires de Cooper. Le reste de la surface de Fermi ne participe pas à l'appariement et est donc susceptible d'intervenir dans un autre mécanisme physique. On peut supposer que ces paires brisées sont disponibles pour un autre appariement donnant lieu, par exemple, à une autre onde plane pour le paramètre d'ordre.

Interaction entre ondes planes à 3D

Dans le cas où le paramètre d'ordre est la somme de plus d'une onde plane, il n'y a pas d'extension connue à l'étude de Fulde et Ferrell, soit en étudiant les excitations des équations de Bogoliubov-de Gennes, soit en cherchant la forme de l'état fondamental. On ne sait donc pas où se fait l'appariement et quelles sont les domaines où les paires sont brisées. Dans ce qui suit, on va donc chercher, à partir des résultats analytiques à température nulle, à dégager des principes heuristiques sur le comportement du système lorsqu'on a plusieurs ondes planes pour le paramètre d'ordre.

Lorsque l'amplitude du paramètre d'ordre tend vers zéro, l'interaction entre deux ondes planes est donnée à l'ordre le plus bas par la contribution en $J(\alpha)$ dans l'énergie où α est la distance angulaire entre les vecteurs d'onde des deux ondes planes. On peut, comme l'on fait Bowers et Rajagopal [72], remarquer que $J(\alpha)$, représentée figure 2.3, présente une divergence pour $\alpha = \psi_0$ et donne globalement une contribution très défavorable à l'énergie pour $\alpha < \psi_0$. Si on associe à chacun des vecteurs d'onde son anneau d'appariement comme défini au paragraphe précédent pour l'onde plane de Fulde-Ferrell, on constate que la limite $\alpha = \psi_0$ correspond au contact entre ces deux anneaux, les anneaux se croisant lorsque $\alpha < \psi_0$.

Il semble que l'image des anneaux d'appariement reste valable dans le cas de plusieurs ondes planes. Le principe physique qui régit cette coexistence et la compétition entre différentes combinaisons d'ondes planes est l'indépendance des appariements. On entend par là que les régions d'appariement des ondes planes

ne se recouvrent pas. Les anneaux d'appariement de chaque onde plane peuvent coexister tant qu'ils occupent des domaines disjoints de la surface de Fermi.

3.3.2 Cascade à 2D

L'indépendance des domaines d'appariement conduit naturellement à une cascade à 2D. En effet, si l'on considère le problème à température non nulle mais très petite, alors le vecteur d'onde optimal $\bar{q}$ est légèrement supérieur à 1, voir figure 1.5, et ψ_0 est petit mais non nul. On va donc supposer, comme à 3D, que les couples de points séparés de ψ_0 et correspondant à chaque onde plane ne doivent pas s'interpénétrer. Ce faisant, on ne peut mettre qu'un nombre fini de ces couples de points sur le cercle de la surface de Fermi. Lorsque la température tend vers zéro, $\bar{q} \to 1$ et $\psi_0 \to 0$. En conséquence, on peut mettre de plus en plus de couples de points sur le cercle et le nombre d'ondes planes du paramètre d'ordre croît d'autant. La limite pour une température nulle est, selon ce raisonnement, un nombre infini d'ondes planes, c'est-à-dire un nombre infini de points sur la surface de Fermi.

On peut renforcer l'argument d'indépendance des appariements en regardant sur la figure 3.5 la forme de la fonction $J(\alpha)$ pour des températures très petites. A l'instar de son comportement à 3D et à température nulle, $J(\alpha)$ possède une partie à petit angle fortement positive et une partie négative à plus grand angle. Le maximum de J, qui fixe en gros la limite de la partie fortement positive, est donné à peu près par $a = \beta^2/2$ ce qui correspond à annuler l'intérieur du cosinus hyperbolique dans l'équation (3.32). L'égalité ci-dessus peut se récrire $(\bar{q}-1)/2t = (1-\cos(\alpha/2))/2\bar{t}$ ou encore $\cos(\alpha/2) = 1/\bar{q}$, c'est-à-dire $1 - \bar{q}\cos(\alpha/2) = 0$: on retrouve l'équation d'annulation de la distance entre les surfaces de Fermi des spins $\uparrow$ et $\downarrow$ ce qui veut dire que l'angle α est égal à l'angle ψ_0. On rappelle que ψ_0 est l'angle de séparation entre les deux domaines d'appariement - qui sont deux points à 2D - placés symétriquement des deux côtés de la direction d'une onde plane. Si l'angle α séparant deux directions d'ondes planes est égal à ψ_0, cela signifie qu'il y a contact entre les deux domaines d'appariement.

Ici encore, on constate que le recouvrement entre les domaines d'appariement correspondant à chaque onde plane donne une contribution fortement défavorable à l'énergie libre. A température petite mais non nulle, l'effet répulsif est moins marqué qu'à température nulle. Il n'y a notamment pas de divergence de J et le passage entre le maximum et le minimum de J est moins abrupt. L'effet des excitations thermiques est donc de lisser les courbes et d'adoucir les comportements abrupts.

Pour conclure, on peut dire que la cascade est simplement due à un rétrécissement de l'extension des régions d'appariement des ondes planes lorsque la température tend vers zéro. Nous avons mis en évidence les liens qui existent entre ces trois propriétés caractéristiques du problème à 2D et à $T = 0$: la non analycité de l'énergie libre, le contact entre les deux surfaces de Fermi et la cascade d'états pour des températures tendant vers zéro.

Par ailleurs, on peut raisonnablement penser que si l'on rentre plus à l'intérieur de la phase condensée à température nulle, l'amplitude du paramètre d'ordre

devient non nul et la taille des zones d'appariement aussi. Dans ce cas, on peut s'attendre à observer une cascade inverse où le nombre d'ondes planes décroît à mesure que l'on pénètre dans la phase condensée.

Chapitre 4

Transition vers les phases FFLO, résultats numériques

Dans les cas particuliers où l'amplitude du paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$ est petite, comme la transition du second ordre à 2D ou le voisinage du point tricritique, un simple développement en $\Delta(\mathbf{r})$ nous a permis une résolution analytique des équations de Gorkov (2.43). Dans les cas plus délicats où cette amplitude n'est pas petite, comme la transition FFLO du premier ordre à 3D, on ne sait pas résoudre les équations de Gorkov qui décrivent la phase condensée dans le cas général. Il est néanmoins possible de simplifier ces équations lorsque l'échelle des variations spatiales du paramètre d'ordre est largement supérieure à λ_F. C'est évidemment le cas pour les phases FFLO où cette échelle est ξ_0. En intégrant sur les petites longueurs d'onde, on obtient les équations quasiclassiques d'Eilenberger [81] qui fournissent un point de départ très commode pour les calculs numériques.

Dans ce chapitre, nous allons tout d'abord décrire en détail comment on obtient, à partir des équations de Gorkov (2.43), les équations quasiclassiques d'Eilenberger. Nous présenterons ensuite une méthode numérique que nous avons mise au point pour résoudre ces équations quasiclassiques. Celle-ci consiste en un développement de Fourier des fonctions de Green quasiclassiques. Comparée à une intégration directe des équations quasiclassiques, notre approche est plus rapide et plus simple. Cette efficacité est d'ailleurs accentuée au voisinage de la ligne de transition entre l'état normal et la phase condensée où nous verrons que les paramètres d'ordre les plus stables ont des harmoniques de faible amplitude. De plus, l'intégration numérique directe devient très lourde lorsque le paramètre d'ordre n'est pas unidimensionnel ce qui, dans notre approche, ne pose pas de difficulté particulière.

On peut ainsi présenter dans ce chapitre des résultats inédits sur la compétition entre phases inhomogènes FFLO qui peuvent varier dans plusieurs directions de l'espace. Nos résultats se limitent cependant à 3D au voisinage de la ligne de transition du premier ordre.

4.1 Formalisme quasiclassique

4.1.1 Approximation quasiclassique

Les équations de Gorkov (2.43) sont des équations microscopiques qui décrivent la physique de la phase superfluide dans le cadre de la théorie BCS. Bien que complètes, elles ne sont pas pratiques à manipuler dans le cadre d'un calcul numérique. Ces équations contiennent en fait trop d'informations pour les cas qui nous intéressent. La double dépendance spatiale, en $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$, des fonctions de Green, donne deux échelles de longueur bien distinctes l'une de l'autre. La structure interne des paires de Cooper est décrite par la dépendance en la coordonnée relative $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ des fonctions de Green. Les variations typiques des fonctions de Green selon $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ se font sur des distances de l'ordre de λ_F ce qui correspond dans l'espace de Fourier à des vecteurs d'onde situés au voisinage de la surface de Fermi [1].

Le mouvement de centre de masse des paires de Cooper est quant à lui décrit par la dépendance en $\mathbf{R}=(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2$ des fonctions de Green. L'échelle caractéristique de cette dépendance est fonction de l'inhomogénéité considérée mais est le plus souvent de l'ordre de ξ_0 - c'est le cas des phases FFLO - c'est-à-dire beaucoup plus grande que λ_F.

L'approximation quasiclassique consiste à négliger λ_F par rapport à ξ_0 et à ne conserver que l'ordre le plus bas du couplage entre ces deux échelles de longueur. On utilisera dans les calculs qui suivent la transformée de Fourier partielle des différentes fonctions de Green définie selon :

$$\mathcal{G}(\mathbf{R},\mathbf{k},i\omega_n)=\int d\mathbf{u}\;\mathcal{G}(\mathbf{R}+\mathbf{u}/2,\mathbf{R}-\mathbf{u}/2,i\omega_n)\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}}, \tag{4.1}$$

$\mathbf{R}$ étant le centre de masse et $\mathbf{k}$ le vecteur d'onde correspondant à la coordonnée relative $\mathbf{u}=\mathbf{r}-\mathbf{r}'$. A partir des équations de Gorkov (2.43) nous allons montrer comment, dans le cadre de l'approximation quasiclassique, on peut développer ces équations en puissance de $\mathbf{k}\cdot\partial_{\mathbf{R}}$ puis les intégrer sur la norme du vecteur d'onde $\mathbf{k}$ tout en conservant l'information sur la direction de $\mathbf{k}$, c'est-à-dire la direction sur la surface de Fermi. Cette procédure permet de dériver les équations quasiclassiques d'Eilenberger. La dépendance en $\mathbf{R}$ est conservée tandis qu'on a fait disparaître la coordonnée relative $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ au profit d'une simple direction sur la surface de Fermi.

4.1.2 Équations quasiclassiques

Détaillons maintenant plus précisément le passage des équations de Gorkov aux équations quasiclassiques. Le changement en coordonnées relative et de centre

[1] plus précisément, les fonctions de Green normale et anormale sont modifiées par l'apparition des paires de Cooper en comparaison de ce qu'elles sont dans l'état normal. Dans l'espace de Fourier, cette modification s'opère au voisinage de la surface de Fermi sur une bande de largeur $1/\xi_0$ (correspondant à l'énergie Δ). Dans l'espace réel, on peut dire que la fonction d'onde d'une paire de Cooper oscille en fonction des positions relatives des deux fermions sur une période de l'ordre de λ_F et s'étend sur une distance de l'ordre de ξ_0.

de masse (4.1) est tel que $\nabla_{\mathbf{r}}/i$ est remplacé par $\nabla_{\mathbf{R}}/2i+\mathbf{k}$. La première équation de Gorkov (2.43a) donne ainsi :

$$\left(i\omega_n - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}+\mathbf{k}\right)^2 + \epsilon_F - \bar{\mu}\sigma_z\right)\mathcal{G}(\mathbf{R},\mathbf{k},i\omega_n) + \int d\mathbf{u}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}}\,\Delta(\mathbf{R}+\mathbf{u}/2)\,\sigma_x\,\mathcal{F}^+(\mathbf{R}+\mathbf{u}/2,\mathbf{R}-\mathbf{u}/2,i\omega_n) = 1. \quad (4.2)$$

Comme $|\mathbf{k}| \simeq \mathbf{k}_F$ est beaucoup plus grand que $|\nabla_{\mathbf{R}}| \simeq 1/\xi_0$, on linéarise l'opérateur différentiel $(\nabla_{\mathbf{R}}/2i+\mathbf{k})^2 \simeq \mathbf{k}^2+\mathbf{k}\cdot\nabla_{\mathbf{R}}/i$ et on remplace dans le second terme de ce développement $\mathbf{k}$ par $\mathbf{k}_F$. La norme du vecteur d'onde est fixée à k_F et sa direction est conservée. Notons que nous avons déjà utilisé fréquemment cette approximation dans les chapitres précédents (notamment dans la sous-section 1.3.2), les vecteurs d'onde pertinents étant toujours au voisinage de la surface de Fermi. On obtient finalement :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}+\mathbf{k}\right)^2 - \epsilon_F \simeq \xi + \hbar\mathbf{v}_F\cdot\frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}. \quad (4.3)$$

Regardons maintenant le second terme de l'équation (4.2). On va faire l'approximation [2] $\Delta(\mathbf{R}+\mathbf{u}/2) \simeq \Delta(\mathbf{R})$. On sort ainsi $\Delta(\mathbf{R})$ de l'intégrale et on obtient :

$$\left(i\omega_n - \xi - \hbar\mathbf{v}_F\cdot\frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i} - \bar{\mu}\sigma_z\right)\mathcal{G}(\mathbf{R},\xi,\mathbf{v}_F,i\omega_n) + \Delta(\mathbf{R})\,\sigma_x\,\mathcal{F}^+(\mathbf{R},\xi,\mathbf{v}_F,i\omega_n) = 1. \quad (4.4)$$

On peut par ailleurs écrire une équation semblable à la première équation de Gorkov (2.43a) où les rôles des positions $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ sont échangées. Les équations du mouvement sur les champs atomiques $\hat{\psi}(\mathbf{r}',\tau)$ et $\hat{\psi}(\mathbf{r}',\tau)^\dagger$ conduisent à la nouvelle équation :

$$\left(-\partial_\tau + \frac{\hbar^2\nabla^2_{\mathbf{r}'}}{2m} + \epsilon_F - \bar{\mu}\sigma_z\right)\mathcal{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) - \Delta^*(\mathbf{r})\mathcal{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)\sigma_x = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\tau) \quad (4.5)$$

avec la définition suivante pour la nouvelle fonction de Green anormale $\mathcal{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)$:

$$\mathcal{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau) = \begin{pmatrix} 0 & -\langle T_\tau\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}',0)\rangle \\ \langle T_\tau\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},\tau)\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}',0)\rangle & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

[2] on peut traiter ce passage de façon plus rigoureuse. En passant en transformées de Fourier, on constate que chaque composante de Fourier de $\Delta(\mathbf{R})$, notée $\Delta_{\mathbf{q}}$, est couplée à la fonction $\mathcal{F}^+(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{q}/2,i\omega_n)$, c'est-à-dire où le vecteur $\mathbf{k}$ est déplacé de $-\mathbf{q}/2$. Ce déplacement modifie peu la dépendance angulaire de $\mathcal{F}^+(\mathbf{R},\mathbf{k},i\omega_n)$ qui est généralement, par rapport à $\mathbf{k}$, une fonction piquée autour de la surface de Fermi $|\mathbf{k}| = k_F$ sur une couche d'épaisseur $1/\xi_0$. Négliger ce déplacement de $-\mathbf{q}/2$ pour la dépendance angulaire revient à négliger des termes d'ordre λ_F/ξ_0. Toutefois ce même décalage de $-\mathbf{q}/2$ change de façon non négligeable la dépendance en la norme de $\mathbf{k}$ de $\mathcal{F}^+(\mathbf{R},\mathbf{k},i\omega_n)$. Ceci n'a cependant aucun effet sur la dérivation des équations quasiclassiques car elles sont obtenues en sommant sur ξ, c'est-à-dire sur toutes les valeurs de $|\mathbf{k}|$. On peut donc oublier ce décalage de $-\mathbf{q}/2$ ce qui conduit directement à l'équation (4.4).

On peut obtenir l'équation (4.5) plus rapidement si l'on utilise les symétries des fonctions de Green (voir **encadré** 5).

Partant maintenant de l'équation (4.5), on applique les mêmes arguments que pour passer de la première équation de Gorkov (2.43a) à l'équation (4.4) et on obtient :

$$\left(i\omega_n - \xi + \hbar\mathbf{v}_F \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i} - \bar{\mu}\sigma_z\right) \mathcal{G}(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n) - \Delta^*(\mathbf{R})\, \mathcal{F}(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n)\sigma_x = 1. \tag{4.7}$$

La soustraction entre les équations (4.4) et (4.7), qui permet de faire disparaître ξ, donne finalement :

$$\hbar\mathbf{v}_F \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{i} \mathcal{G}(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n) = \Delta^*(\mathbf{R})\, \mathcal{F}(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n)\sigma_x + \Delta(\mathbf{R})\, \sigma_x\, \mathcal{F}^+(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n). \tag{4.8}$$

Le grand intérêt de cette dernière expression par rapport aux équations (4.4) et (4.7) est que ξ n'est plus apparent. On peut donc intégrer par rapport à ξ et faire ainsi disparaître ξ des variables du problème.

Avant de procéder à cette intégration, nous allons dériver des expressions similaires pour les fonctions de Green anormales $\mathcal{F}$ et $\mathcal{F}^+$. On applique les mêmes approximations que précédemment à la seconde équation de Gorkov (2.43b) et à sa symétrique par rapport à $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$:

$$\left(-\partial_\tau + \frac{\hbar^2\nabla^2_{\mathbf{r}'}}{2m} + \epsilon_F + \bar{\mu}\sigma_z\right) \mathcal{F}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) - \Delta^*(\mathbf{r})\, \mathcal{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)\, \sigma_x = 0, \tag{4.9}$$

qu'on dérive simplement en utilisant les symétries sur les fonctions de Green (voir **encadré** 5). La fonction de Green $\mathcal{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)$ est définie par :

$$\mathcal{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \begin{pmatrix} \langle T_\tau \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}, \tau)\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}', 0)\rangle & 0 \\ 0 & \langle T_\tau \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}, \tau)\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}', 0)\rangle \end{pmatrix}. \tag{4.10}$$

On obtient finalement les deux équations suivantes :

$$\left(-i\omega_n - \xi - \hbar\mathbf{v}_F \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i} - \bar{\mu}\sigma_z\right) \mathcal{F}^+ - \Delta^*(\mathbf{R})\, \sigma_x\, \mathcal{G} = 0, \tag{4.11}$$

$$\left(i\omega_n - \xi + \hbar\mathbf{v}_F \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i} + \bar{\mu}\sigma_z\right) \mathcal{F}^+ - \Delta^*(\mathbf{R})\, \mathcal{G}^+\, \sigma_x = 0, \tag{4.12}$$

où la dépendance des fonctions de Green $\mathcal{F}^+$, $\mathcal{G}$ et $\mathcal{G}^+$ en $(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n)$ est implicite. Ici encore, on soustrait les deux équations pour faire disparaître ξ ce qui conduit à :

$$2\left(i\omega_n + \bar{\mu}\sigma_z + \hbar\mathbf{v}_F \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}\right) \mathcal{F}^+ = \Delta^*(\mathbf{R})(\mathcal{G}^+\, \sigma_x - \sigma_x\, \mathcal{G}). \tag{4.13}$$

De même, on peut dériver une équation quasiclassique pour $\mathcal{F}$ en suivant la même méthode. On obtient :

$$2\left(i\omega_n - \bar{\mu}\sigma_z - \hbar\mathbf{v}_F \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}\right) \mathcal{F} = \Delta(\mathbf{R})(\mathcal{G}\, \sigma_x - \sigma_x\, \mathcal{G}^+). \tag{4.14}$$

Fonctions de Green quasiclassiques

On introduit les fonctions de Green quasiclassiques :

$$g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = i \int \frac{d\xi}{\pi} \mathcal{G}_{2,2}(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n), \tag{4.15}$$

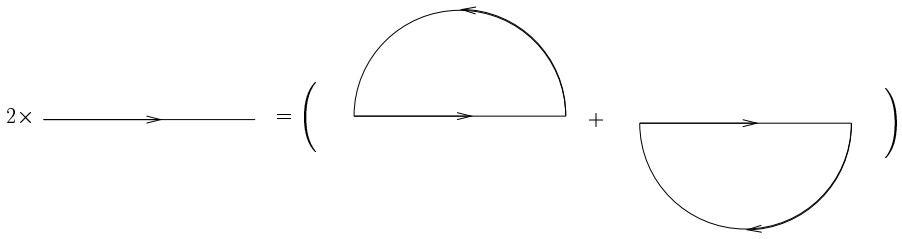
$$f(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = -\int \frac{d\xi}{\pi} \mathcal{F}_{2,1}(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n), \tag{4.16}$$

$$f^+(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = \int \frac{d\xi}{\pi} \mathcal{F}^+_{1,2}(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n), \tag{4.17}$$

où $\bar{\omega}_n = \omega_n - i\bar{\mu}$. Nous verrons en effet que $\bar{\omega}_n$ apparaît comme une variable indépendante dans les équations quasiclassiques. Prendre le complexe conjugué de $\bar{\omega}_n$ revient à changer $\bar{\mu}$ en $-\bar{\mu}$ et donc à renverser les spins (voir **encadré** 5). Cela signifie par exemple que l'on a $g(\bar{\omega}_n^*) = (i/\pi) \int d\xi\, \mathcal{G}_{1,1}(i\omega_n)$. Par ailleurs, on n'a pas besoin de définir de fonction de Green quasiclassique g^+ car la symétrie particule-trou $\mathcal{G}(\xi) = \sigma_x \mathcal{G}^+(-\xi)\sigma_x$ conduit à la relation :

$$g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = -i \int \frac{d\xi}{\pi} \mathcal{G}^+_{1,1}(\mathbf{R}, \xi, \mathbf{v}_F, i\omega_n). \tag{4.18}$$

Le chemin d'intégration sur la variable ξ dans la définition des fonctions de Green quasiclassiques est l'axe réel au sens de la partie principale. Comme le fait remarquer Eilenberger [81], ce chemin peut être remplacé par la demi-somme de deux contours. Le premier est un demi-cercle dont la taille tend vers l'infini qui entoure le demi-plan supérieur juste au dessus de l'axe réel. La contribution de la partie courbée du demi-cercle qui est à l'infini est nulle. Le second contour est le symétrique du premier par rapport à l'axe réel, entourant le demi-plan inférieur en passant juste en dessous de l'axe réel. Le principe de ces contours est représenté sur ce schéma :



L'intégration des équations (4.8), (4.13) et (4.14) par rapport à ξ nous conduit finalement aux équations quasiclassiques d'Eilenberger [3] :

$$(2\bar{\omega}_n + \hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla_{\mathbf{R}})\, f(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = 2\Delta(\mathbf{R}) g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n), \tag{4.19a}$$

$$(2\bar{\omega}_n - \hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla_{\mathbf{R}})\, f^+(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = 2\Delta^*(\mathbf{R}) g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n), \tag{4.19b}$$

$$\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla_{\mathbf{R}} g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = \Delta^*(\mathbf{R}) f(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) - \Delta(\mathbf{R}) f^+(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n). \tag{4.19c}$$

[3] le passage d'une forme matricielle pour les équations (4.8), (4.13) et (4.14) à une forme scalaire pour les équations quasiclassiques (4.19) est dû à la symétrie de la forme matricielle pour laquelle la moitié des équations s'obtient en remplaçant $\bar{\omega}_n$ par $\bar{\omega}_n^*$ dans l'autre moitié.

Les équations obtenues sont simples et compactes et ne dépendent que du nombre minimum de paramètres nécessaires pour décrire les phases FFLO. Elles ont été dérivées en premier et indépendamment par Eilenberger [81, 82] et par Larkin et Ovchinnikov [83].

Encadré 5 : Symétries des fonctions de Green

Les quatre fonctions de Green $\mathcal{G}$, $\mathcal{G}^+$, $\mathcal{F}$ et $\mathcal{F}^+$, elles-mêmes définies comme des matrices 2×2 pour les variables de spin, peuvent être regroupées dans une matrice plus générale de taille 4×4. C'est la matrice de Nambu, définie par :

$$\mathcal{N} = \begin{pmatrix} \mathcal{G} & \mathcal{F} \\ \mathcal{F}^+ & \mathcal{G}^+ \end{pmatrix}, \tag{B5-1}$$

dans laquelle on mélange les variables de spin et les degrés de liberté particule-trou. $\mathcal{N}$ contient de nombreuses informations sur les corrélations du système mais ces différents éléments ne sont pas indépendants. Ainsi les symétries particule-trou conduisent aux équations suivantes :

$$\mathcal{G}^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}, -\tau) = \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau), \qquad \mathcal{F}(\mathbf{r}', \mathbf{r}, -\tau) = \sigma_x \mathcal{F}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)\sigma_x, \tag{B5-2}$$

$$\mathcal{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \mathcal{G}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}', -\tau), \qquad \mathcal{F}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = -\left[\mathcal{F}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', -\tau)\right]^*, \tag{B5-3}$$

et le renversement au spin est équivalent au changement $\bar{\mu} \to -\bar{\mu}$. On explique ainsi pourquoi il est possible de réduire les équations de Gorkov (2.43) à deux équations appliquées à des scalaires ; les autres formes des équations de Gorkov découlant du changement $\bar{\mu} \to -\bar{\mu}$ ainsi que des relations (B5-2) et (B5-3).
Les symétries des fonctions de Green sont évidemment à l'origine de symétries des fonctions de Green quasiclassiques. On donne ici les principales :

$$f^*(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = f^+(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, -\bar{\omega}_n^*), \tag{B5-4}$$

$$g^*(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = -g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, -\bar{\omega}_n^*), \tag{B5-5}$$

$$f^*(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = f^+(\mathbf{R}, -\mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n^*), \tag{B5-6}$$

$$g^*(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = g(\mathbf{R}, -\mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n^*). \tag{B5-7}$$

4.1.3 Formalisme plus général

On a donc procédé à une simplification des équations de Gorkov en intégrant sur les degrés de liberté dont les variations typiques se font sur des longueurs petites devant l'échelle ξ_0 des variations du paramètre d'ordre. En quelque sorte, on a effectué une moyenne à gros grain sur des tailles de l'ordre de λ_F si bien que l'on peut voir les équations quasiclassiques d'Eilenberger comme une version mésoscopique des équations de Gorkov.

Les équations quasiclassiques ont par ailleurs la forme d'équations de transport. En fait, on peut montrer que ces équations découlent d'un cadre beaucoup plus général [84] si bien qu'on peut facilement les étendre à des situations plus

complexes où l'on inclut les effets à N corps. Par exemple, l'étude quasiclassique du problème FFLO bidimensionnel de Burkhardt et Rainer [37] inclut les effets des liquides de Fermi. Le principe de l'approximation quasiclassique s'applique à tous les phénomènes dont la longueur caractéristique est grande devant λ_F. On peut alors intégrer sur les petites échelles l'équation de Dyson décrivant à l'échelle microscopique le problème à N corps. Le formalisme obtenu est très général et décrit aussi bien les phases superfluides que les phases normales, les systèmes denses ou les systèmes dilués. On dérive ainsi des équations qui peuvent décrire le transport ; on retrouve notamment par ce biais l'équation phénoménologique de Landau-Boltzmann. Dans notre cas, on a pu démontrer les équations d'Eilenberger.

Les méthodes quasiclassiques inspirées des équations d'Eilenberger ont donné lieu à de nombreux travaux pour comprendre la physique de l'hélium 3 [84] ou des supraconducteurs, notamment dans les systèmes mésoscopiques [85].

4.1.4 Nouvelles expressions quasiclassiques

Maintenant que l'on a simplifié les équations de Gorkov, il reste à vérifier que le formalisme variationnel vu au chapitre 2 peut s'écrire uniquement avec les fonctions de Green quasiclassiques. Nous verrons que c'est le cas et que, plus généralement, toutes les observables qui nous intéressent dépendent de ces fonctions de Green quasiclassiques.

Équation du gap

L'équation du gap fait intervenir la fonction de Green :

$$\mathcal{F}^+_{1,2}(\mathbf{r},\mathbf{r},i\omega_n) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}\, \mathcal{F}^+_{1,2}(\mathbf{r},\mathbf{k},i\omega_n) \tag{4.20}$$

le terme dans l'intégrale étant défini par l'équation (4.1). L'intégration se faisant au voisinage de la surface de Fermi, on sépare l'intégration angulaire de l'intégration sur ξ ce qui donne :

$$\mathcal{F}^+_{1,2}(\mathbf{r},\mathbf{r},i\omega_n) \simeq N_0 \int_{S_F} d\tilde{\Omega}_{\mathbf{v}_F} \int d\xi\, \mathcal{F}^+_{1,2}(\mathbf{r},\mathbf{v}_F,\xi,i\omega_n), \tag{4.21}$$

et on en déduit la forme suivante pour l'équation du gap :

$$\frac{\Delta(\mathbf{R})}{\lambda} = \pi T \sum_{n\geq 0} \int_{S_F} d\tilde{\Omega}_{\mathbf{v}_F} \left[f(\mathbf{R},\mathbf{v}_F,\bar{\omega}_n) + f(\mathbf{R},\mathbf{v}_F,\bar{\omega}_n^*) \right], \tag{4.22}$$

où l'on a utilisé la définition $\lambda = gN_0$ ainsi que les relations de symétrie des fonctions de Green quasiclassiques (voir **encadré** 5). La substitution $1/\lambda = \ln(T/T_c^0) + 2\pi T \sum_{n\geq 0} 1/\omega_n$ conduit finalement à l'expression :

$$\Delta(\mathbf{R}) \ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) = \pi T \sum_{n=0}^{+\infty} \left[\int d\tilde{\Omega}_{\mathbf{v}_F} \left(f(\mathbf{R},\mathbf{v}_F,\bar{\omega}_n) + f(\mathbf{R},\mathbf{v}_F,\bar{\omega}_n^*) \right) - \frac{2\Delta(\mathbf{R})}{\omega_n} \right]. \tag{4.23}$$

Énergie libre

Le calcul de l'énergie libre (2.50) est similaire au calcul de l'équation du gap. La trace sur la fonction de Green $\mathcal{G}$ intégrée sur ξ donne la somme $g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) + g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n^*) = g(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) + g^*(\mathbf{R}, -\mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n)$ (voir **encadré** 5). Finalement, on obtient l'expression suivante :

$$F_h = 4\pi T N_0 \int d\mathbf{R} \sum_{n\geq 0} \int_{\omega_n}^{+\infty} d\omega \int d\tilde{\Omega}_{\mathbf{v}_F} \mathrm{Re}\left[\mathrm{g}(\mathbf{R}, \mathbf{v}_\mathrm{F}, \bar{\omega})\right]. \tag{4.24}$$

L'énergie libre pertinente est l'énergie réduite $\Omega = \Delta F / N_0$ mesurant la différence d'énergie avec l'état normal. On montre que $g_0(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}_n) = \mathrm{sgn}(\omega_n)$ dans l'état normal d'où la formule $\Omega = \int d\mathbf{R} \bar{\Omega}(\mathbf{R})$ avec :

$$\bar{\Omega}(\mathbf{R}) = |\Delta(\mathbf{R})|^2 \ln\left(\frac{T}{T_c^0}\right) + 4\pi T \sum_{n\geq 0} \int_{\omega_n}^{+\infty} d\omega \int d\tilde{\Omega}_{\mathbf{v}_F} \mathrm{Re}\left[\mathrm{g}(\mathbf{R}, \mathbf{v}_\mathrm{F}, \bar{\omega}) - 1 + \frac{|\Delta(\mathbf{R})|^2}{2\omega^2}\right]. \tag{4.25}$$

4.1.5 Normalisation et conclusion

Il reste maintenant à écrire une relation de normalisation (voir l'**encadré** 6) pour les fonctions de Green quasiclassiques puisque les équations quasiclassiques d'Eilenberger définissent seulement celles-ci à une constante multiplicative près (contrairement aux équations de Gorkov). Eilenberger a montré [81] que cette relation de normalisation était :

$$g^2 + f f^+ = 1, \tag{4.26}$$

ce qu'on peut vérifier immédiatement pour l'état normal pour lequel $f_0 = f_0^+ = 0$ et $g_0 = \mathrm{sgn}(\omega_n)$.

On comprend maintenant l'intérêt de l'intégration sur la variable ξ. En effet, rien n'empêche d'utiliser directement les équations (4.8), (4.13) et (4.14) pour lesquelles ξ est une variable muette. Cependant, on ne sait alors pas déterminer de constante de normalisation et celle-ci dépend évidemment de ξ. Dans l'état normal par exemple $\mathcal{G}_0 = (i\omega_n - \xi - \bar{\mu}\sigma_z)^{-1}$.

En conclusion, on a rappelé ici le principe et la dérivation d'un formalisme quasiclassique issu des équations de Gorkov où l'on a ramené le nombre de variables à son minimum. Les équations de base de ce formalisme que sont : les équations d'Eilenberger (4.19), l'équation du gap (4.23) et l'énergie libre réduite (4.25) vont nous permettre une exploration numérique de la transition FFLO à 3D.

Encadré 6 : Normalisation du formalisme quasiclassique

Dans cet encadré, nous allons montrer avec des arguments simples la relation de normalisation des fonctions de Green quasiclassiques :

$$g^2 + ff^+ = 1. \tag{B6-1}$$

On peut récrire les équations quasiclassiques sous une forme plus compacte qui rend plus apparente la symétrie particule-trou. On définit pour cela la matrice 2×2 :

$$\hat{g} = \begin{pmatrix} g & -if \\ if^+ & -g \end{pmatrix}, \tag{B6-2}$$

et les équations d'Eilenberger prennent la forme matricielle :

$$\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \hat{g} = \hat{g}\bar{T} - \bar{T}\hat{g} \qquad \text{avec} \qquad \bar{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \bar{\omega}_n & -i\Delta(\mathbf{R}) \\ i\Delta^*(\mathbf{R}) & -\bar{\omega}_n \end{pmatrix}. \tag{B6-3}$$

$\hat{g}$ est une matrice de trace nulle. Par conséquent, $\hat{g}$ est engendrée par les matrices σ_x, σ_y σ_z et son carré est proportionnel à la matrice unité. Plus précisément $\hat{g}^2 = (g^2 + ff^+)\mathbb{1}$. On pose $\kappa(\mathbf{R}) = (g^2 + ff^+)(\mathbf{R})$ et on va montrer que $\kappa(\mathbf{R})$ ne dépend pas de $\mathbf{R}$. En effet,

$$\frac{\hbar}{2}\mathbf{v}_F \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \hat{g}^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\mathbf{v}_F \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \kappa\right) \mathbb{1} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathrm{g}}^2 \bar{\mathrm{T}} - \bar{\mathrm{T}}\hat{\mathrm{g}}^2\right), \tag{B6-4}$$

et la trace de cette expression donne directement $\mathbf{v}_F \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \kappa = 0$. On en déduit que κ est une constante.

Afin de déterminer cette constante, on suppose qu'on peut étendre le système vers une région de l'espace où le paramètre d'ordre est une constante Δ. Dans ce cas, on résout les équations de Gorkov et on calcule les fonctions de Green quasiclassiques. On trouve $g = \bar{\omega}_n/\sqrt{\bar{\omega}_n^2 + |\Delta|^2}$, $f = \Delta/\sqrt{\bar{\omega}_n^2 + |\Delta|^2}$ et $f^+ = \Delta^*/\sqrt{\bar{\omega}_n^2 + |\Delta|^2}$. La relation de normalisation est donc $\kappa = g^2 + ff^+ = 1$.

4.2 Développement de Fourier des équations quasiclassiques

L'utilisation des équations quasiclassiques d'Eilenberger dans l'étude des phases FFLO n'est pas nouvelle, que ce soit à 2D [37] ou à 3D [79]. Ces travaux numériques menés dans le cas purement paramagnétique [4] (voir la section 1.2.1) traitent le cas d'un paramètre d'ordre unidimensionnel en intégrant numériquement les équations de transport d'Eilenberger (4.19), puis en cherchant à minimiser l'énergie libre et à trouver la forme optimale pour le paramètre d'ordre à l'aide de

[4] les équations quasiclassiques ont aussi servi à étudier la compétition entre les effets paramagnétique et orbital [18, 31].

l'équation du gap. Le gros avantage de ces méthodes est qu'il est possible d'explorer tout le domaine du plan $(\bar{\mu}, T)$ et d'étudier aussi bien la transition normal-FFLO que la transition FFLO-BCS homogène. Une intégration numérique directe des équations quasiclassiques est limitée par le fait qu'elle devient trop lourde numériquement pour des paramètres d'ordre variant dans deux ou trois directions de l'espace.

A 3D Matsuo *et coll.* [79] ont regardé la transition entre la phase normale et la phase FFLO de forme sinusoïdale et unidimensionnelle. Ils trouvent que la transition, qui est du premier ordre près du point tricritique, devient du second ordre en dessous de $T = 0.075T_c^0$ et jusqu'à $T = 0$ alors qu'on sait que la transition vers la phase FFLO tridimensionnelle $\Delta(\mathbf{r}) = \bar{\Delta}(\cos(qx) + \cos(qy) + \cos(qz))$ est du premier ordre à température nulle [3, 72].

Notre méthode de résolution des équations quasiclassiques va nous permettre de considérer des paramètres d'ordre tridimensionnels et donc d'attaquer le problème de la transition entre l'état normal et les phases inhomogènes FFLO à basse température. Pour cela, nous allons nous restreindre à des paramètres d'ordre qui sont la somme d'ondes planes. Nous ne considérerons pas dans notre étude la possibilité de regarder plus à l'intérieur des phases FFLO et d'étudier notamment la transition entre les phases FFLO et la phase homogène BCS. La structure du paramètre d'ordre permet une résolution des équations quasiclassiques qui prend la forme d'un développement de Fourier des fonctions de Green quasiclassiques. Ce développement converge très rapidement vers la solution exacte et nous montrerons que seul un petit nombre de termes est nécessaire pour obtenir des résultats quantitatifs appréciables.

Dans un premier temps, nous allons expliquer en détail le principe du développement de Fourier dans le cas d'un paramètre d'ordre unidimensionnel et sinusoïdal et nous préciserons la vitesse de convergence de la méthode. Nous retrouverons notamment les résultats de Matsuo *et coll.* [79]. Ensuite, nous montrerons que l'inclusion d'une harmonique dans la forme du paramètre d'ordre ne change pas quantitativement les résultats ce qui justifiera *a posteriori* notre approximation initiale pour le paramètre d'ordre. Le cas des paramètres d'ordre tridimensionnels sera traité dans la section suivante.

4.2.1 Paramètre d'ordre sinusoïdal

Le paramètre d'ordre est de la forme :

$$\Delta(\mathbf{r}) = 2\Delta_1 \cos(\bar{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{r}), \tag{4.27}$$

où l'on a effectué le changement de variable $\mathbf{r} = (2\bar{\mu}/\hbar v_F)\mathbf{R}$, le vecteur d'onde $\bar{\mathbf{q}}$ étant aussi sans unité (voir l'équation (1.26)). Avec ces définitions, les équations quasiclassiques prennent la forme adimensionnée :

$$\left(\bar{\omega} + \hat{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}\right) f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{k}}, \bar{\omega}) = \Delta(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{k}}, \bar{\omega}), \tag{4.28a}$$

$$2\hat{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} g(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{k}}, \bar{\omega}) = \Delta^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{k}}, \bar{\omega}) - \Delta(\mathbf{r}) f^+(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{k}}, \bar{\omega}), \tag{4.28b}$$

où $\hat{\mathbf{k}}$ est le vecteur unitaire spécifiant la direction sur la surface de Fermi, Δ et ω sont en unité de $\bar{\mu}$ et $\bar{\omega} = \omega - i$.

On suppose que les fonctions de Green quasiclassiques f, f^+ et g ont le même caractère périodique que $\Delta(\mathbf{r})$. Le développement de Fourier donne donc :

$$f(\mathbf{r}) = \sum_n f_n e^{in\bar{\mathbf{q}}\cdot\mathbf{r}}, \quad f^+(\mathbf{r}) = \sum_n f_n^+ e^{in\bar{\mathbf{q}}\cdot\mathbf{r}}, \quad g(\mathbf{r}) = \sum_n g_n e^{in\bar{\mathbf{q}}\cdot\mathbf{r}}, \tag{4.29}$$

et les équations quasiclassiques deviennent :

$$f_n = \frac{\Delta_1}{\bar{\omega} + inQ}(g_{n+1} + g_{n-1}), \tag{4.30}$$

$$f_n^+ = \frac{\Delta_1}{\bar{\omega} - inQ}(g_{n+1} + g_{n-1}), \tag{4.31}$$

$$g_n = \frac{\Delta_1}{2inQ}(f_{n+1} + f_{n-1} - f_{n-1}^+, -f_{n+1}^+) \quad \text{pour} \quad \text{n} \neq 0 \tag{4.32}$$

avec $Q = \hat{\mathbf{k}} \cdot \bar{\mathbf{q}} = \bar{q}\cos\theta$, θ est l'angle entre $\mathbf{v}_F$ et $\mathbf{q}$. Par commodité, on introduit $D_n = (f_n - f_n^+)/2inQg_0$ et $G_n = g_n/g_0$ (en particulier $G_0 = 1$), les équations se récrivent :

$$D_n = -\frac{\Delta_1}{\bar{\omega}^2 + (nQ)^2}(G_{n-1} + G_{n+1}), \tag{4.33a}$$

$$G_n = \frac{\Delta_1}{n}[(n-1)D_{n-1} + (n+1)D_{n+1}]. \tag{4.33b}$$

Ces équations donnent deux systèmes d'équations découplées : soit les G_n pour n pair sont couplés aux D_n pour n impair, soit les G_n pour n impair sont couplés aux D_n pour n pair. Dans l'état normal, seul G_0 est non nul. On en déduit de façon perturbative que G_{2n+1} et D_{2n} restent nuls dans l'état condensé et ce pour tout n.

Les symétries $G_n = G_{-n}$ et $D_n = D_{-n}$ font que l'on peut se restreindre aux $n \geq 0$. Les équations étant linéaires, la normalisation vient de l'équation (4.26) qui s'écrit $g_0^2 + \sum_n (g_n g_{-n} + f_n f_{-n}^+) = 1$. Récrite en fonction des G_n et des D_n, cette condition de normalisation permet de calculer g_0 qui est la quantité intervenant dans l'expression de l'énergie libre (car $\int d\mathbf{r} g(\mathbf{r}, Q, \omega) = g_0(Q, \omega)$) :

$$g_0 = \left(1 + 2\sum_{n>0} G_n^2 + 2\sum_{n>0}\left[\bar{\omega}^2 - (nQ)^2\right] D_n^2\right)^{-1/2}. \tag{4.34}$$

Position de la transition FFLO

On va étudier grâce à ce formalisme les caractéristiques de la transition entre l'état normal et la phase FFLO unidimensionnelle et sinusoïdale. Pour $\Delta(\mathbf{r})$ de la forme (4.27), l'énergie libre (4.25) s'écrit en unité de $\bar{\mu}^2$:

$$\frac{\Omega}{2} = \Delta_1^2 \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) + 2\pi t \sum_{n\geq 0} \int_{\omega_n}^{+\infty} d\omega \int_{S_F} d\tilde{\Omega} \left[\mathrm{Re}\, g_0(\Delta_1, \bar{\mathrm{q}}, \theta, \omega) - 1 + \frac{\Delta_1^2}{\omega^2}\right] \tag{4.35}$$

où $t = T/\bar{\mu}$ est une température réduite ($\omega_n = \pi t(2n+1)$). La transition du premier ordre est telle que $\Omega = 0$ avec $\Delta_1 \neq 0$. On peut donc à partir cette équation donnant l'énergie libre écrire une expression de la température T en fonction de t et la forme du paramètre d'ordre (donnée par $\bar{q}$ et Δ_1). La maximisation de cette expression à t fixé nous donne la position de la transition ainsi que la structure du paramètre d'ordre à la transition.

Pour une même valeur de t, on peut aussi déterminer la température de l'instabilité FFLO qu'on note T_{FFLO}. Le rapport T/T_{FFLO} indique la distance relative à t fixé entre la transition du premier ordre et l'instabilité FFLO. Comme t est fixé, ce rapport est aussi égal à $\bar{\mu}/\bar{\mu}_{FFLO}$ où $\bar{\mu}_{FFLO}$ désigne le champ critique de l'instabilité FFLO. Nous verrons que ce rapport reste toujours proche de 1 ce qui signifie que les deux lignes de transition, la transition du premier ordre et l'instabilité FFLO, sont très proches dans le plan $(\bar{\mu}, T)$.

Dans la recherche des formes les plus stables du paramètre d'ordre, on s'aide aussi de l'équation du gap (4.23). Celle-ci montre que la forme du paramètre d'ordre (4.27) que nous avons choisie ne peut pas être solution de l'équation du gap mais seulement une solution approchée qui néglige les harmoniques d'ordre impair. On peut projeter (4.23) sur la fréquence spatiale fondamentale (celle de $\Delta(\mathbf{r})$), on obtient :

$$\Delta_1 \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) = 2\pi t \sum_{n\geq 0} \left[\int_{S_F} d\tilde{\Omega}\, \mathrm{Re} f_1(\Delta_1, \bar{q}, \theta, \omega_n) - \frac{\Delta_1}{\omega_n}\right] \tag{4.36}$$

où l'on a utilisé le fait que $f(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega}^*) = f^*(\mathbf{R}, \mathbf{v}_F, \bar{\omega})$ pour un paramètre d'ordre réel.

4.2.2 Convergence de la méthode

A partir des valeurs de ω et de Q, on souhaite déterminer la solution des relations de récurrence (4.33) normalisée par l'équation (4.34) qui donne g_0. La donnée de deux coefficients successifs, G_{2n} et D_{2n+1}, étant suffisante pour déterminer l'ensemble des coefficients G_n et D_n, la solution générale de (4.33) est une combinaison linéaire de deux solutions particulières de (4.33), qui sont choisies linéairement indépendantes. Le choix le plus commode pour ces deux solutions particulières consiste à considérer deux solutions dont les comportements à grand n sont différents ce qui les rend automatiquement linéairement indépendantes.

A grand n, on peut déduire du système (4.33) une relation de récurrence entre les coefficients g_{2n} :

$$\Delta_1^2 (G_{2n+2} + G_{2n-2}) + (2nQ) G_{2n} = 0. \tag{4.37}$$

On cherche tout d'abord une solution de (4.33) rapidement décroissante, c'est-à-dire telle que $G_{2n+2} \ll G_{2n} \ll G_{2n-2}$. On obtient le comportement asymptotique :

$$G_{2n} \sim (-1)^n \left(\frac{\Delta_1}{2Q}\right)^{2n} \frac{1}{(n!)^2}, \tag{4.38}$$

qui tend rapidement vers zéro.

Pour la seconde solution, on suppose qu'elle est rapidement croissante, c'est-à-dire que $G_{2n-2} \ll G_{2n} \ll G_{2n+2}$. On obtient le comportement asymptotique :

$$G_{2n+2} \sim (-1)^n \left(\frac{2Q}{\Delta_1}\right)^{2n} (n!)^2, \tag{4.39}$$

qui diverge à grand n.

Toute combinaison linéaire de ces deux solutions, non colinéaire à la première solution particulière, a le comportement asymptotique (4.39) dominant de la seconde solution particulière. Par conséquent la solution physique, qui doit être normalisable, est forcément colinéaire à la première solution particulière, et possède le même comportement asymptotique (4.38) à grand n.

Cette décroissance très rapide des coefficients G_n et D_n de la solution physique va nous aider à construire une suite de solutions approchées convergeant rapidement vers la solution physique exacte. Pour cela, on utilise le fait que G_n et D_n sont petits à grand n pour la solution exacte, et on fait l'approximation que $G_n = 0$ et $D_n = 0$ pour $n > N_{\max}$. Cette approximation donne une condition aux limites à partir de laquelle on détermine tous les coefficients pour $n \leq N_{\max}$ qu'on normalise ensuite en imposant $G_0 = 1$. On trouve ensuite g_0 à partir de l'équation (4.34). Cette solution approchée converge rapidement vers la solution exacte lorsque $N_{\max} \to +\infty$.

D'un point de vue pratique, on peut procéder de la façon suivante : une fois la condition d'annulation fixée avec $N_{\max}$, on pose par exemple $G_{N_{\max}} = 1$ pour $N_{\max}$ pair, ou $D_{N_{\max}} = 1$ pour $N_{\max}$ impair et on remonte par récurrence et en utilisant le système (4.33) aux coefficients plus petits. La solution obtenue est forcément une combinaison linéaire des deux solutions particulières mentionnées précédemment. La condition aux limites choisie tend cependant à privilégier la solution rapidement décroissante. Une fois la série de coefficients calculée, on utilise la linéarité des équations (4.33) pour renormaliser les coefficients de telle sorte que $G_0 = 1$. Une autre façon d'obtenir les coefficients d'une solution approchée consiste à écrire les équations (4.33) sous forme matricielle et à inverser la matrice afin d'obtenir la suite des coefficients. Cette autre méthode sera nécessaire dans les cas plus complexes.

Comparaison des solutions pour différents $N_{\max}$

A partir de la méthode de résolution que nous venons de proposer, on calcule la ligne de transition FFLO en fonction de la température et pour différentes valeurs de $N_{\max}$. On constate sur la figure 4.1 que la convergence est très rapide, les courbes $N_{\max} = 5$ et $N_{\max} = 6$ étant presque indistinguables. La vitesse de convergence est confirmée par le tableau suivant qui donne la température critique pour laquelle la transition redevient du second ordre ($T/T_{FFLO} = 1$) en fonction de la valeur de $N_{\max}$:

$N_{\max} = 1$	$N_{\max} = 2$	$N_{\max} = 3$	$N_{\max} = 4$	$N_{\max} = 5$	$N_{\max} = 6$
0.195	...	0.063	0.074	0.076	0.076

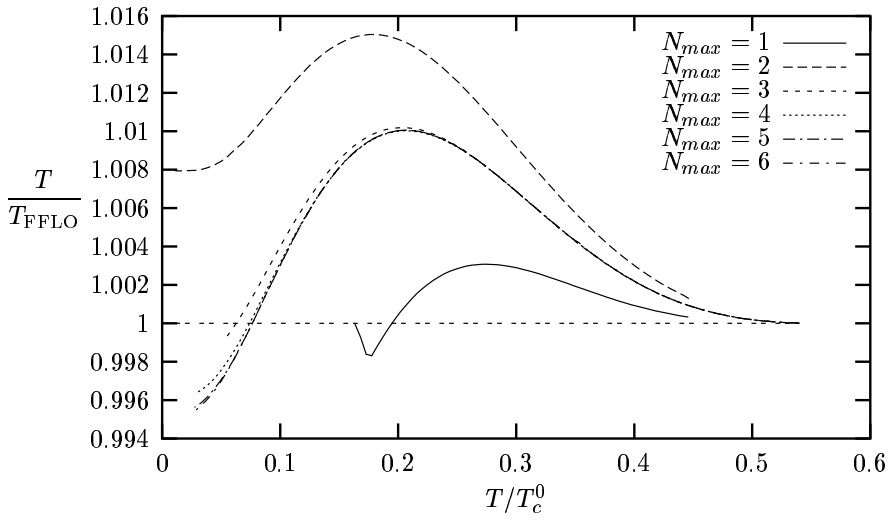


FIG. 4.1: Cet ensemble de courbes représente, pour différentes valeurs de $N_{\max}$, le calcul numérique de la température de transition T vers la phase FFLO sinusoïdale optimale. On ramène cette température : en ordonnée à la température de l'instabilité FFLO notée T_{FFLO}, en abscisse à la température critique pour $\bar{\mu} = 0$, notée T_c^0. La convergence est très rapide et l'approximation $N_{\max} = 5$ est déjà quantitativement largement suffisante.

La valeur limite de cette température, $T/T_c^0 = 0.076$ est en bon accord avec les résultats de Matsuo *et coll.* [79].

Pour chaque valeur de $N_{\max}$, il est en principe possible d'écrire une expression analytique pour g_0 même si celles-ci deviennent rapidement intraitables. Dans l'approximation la plus simple où $N_{\max} = 1$, on obtient simplement :

$$g_0 = \left(1 + 2\Delta_1^2 \frac{\bar{\omega}^2 - Q^2}{(\bar{\omega}^2 + Q^2)^2}\right)^{-1/2} . \tag{4.40}$$

Cette expression est correcte jusqu'au second ordre en Δ et prédit ainsi la bonne ligne d'instabilité FFLO. Par ailleurs, elle donne le bon comportement qualitatif pour la transition FFLO du premier ordre (voir figure 4.1) même si elle prédit un changement d'ordre de la transition pour $T/T_c^0 = 0.195$ au lieu de $T/T_c^0 = 0.076$.

De façon plus générale, pour $N_{\max}$ fixé, l'expression analytique donnant g_0 est correcte jusqu'à l'ordre $2N_{\max}$ en Δ. On peut donc voir notre méthode numérique comme une sorte de développement en Δ de l'énergie. La disparition des problèmes liés à l'annulation des coefficients (voir la sous-section 3.1.4) vient de ce que les différents termes du développement proviennent eux-mêmes de resommations qui sont automatiquement effectuées dans ce formalisme.

Remarque sur l'intégration angulaire de g_0

L'intégration angulaire sur θ de l'équation (4.35) peut se récrire comme une intégrale sur $u = \cos\theta$ variant de -1 à 1. Numériquement, on constate que la forme de g_0 en fonction de u devient de moins en moins lisse lorsque ω tend vers zéro.

Les pôles de $g_0(u)$, la variable u étant prolongée dans le plan complexe, sont exclus de l'axe réel pour $\omega > 0$ comme on le voit par exemple dans l'équation (4.40). Ces pôles tendent néanmoins vers l'axe réel lorsque ω tend vers zéro. Ce comportement explique la forme de plus en plus accidentée de $g_0(u)$ pour des petites valeurs de ω. Il est vraisemblablement lié à la singularité à température nulle de l'énergie libre qui conduit aux multiples changements de signe dans le développement en Δ de cette énergie (voir la sous-section 3.1.4). L'intégration numérique sur u fait donc disparaître la singularité et donne un formalisme qui converge sans accident vers la solution. Ceci se fait cependant au prix d'une intégration angulaire qui peut être lourde numériquement à basse température, c'est-à-dire quand les petites valeurs de ω interviennent.

4.2.3 Ajout d'une harmonique au paramètre d'ordre

On a supposé dans ce qui précède que le paramètre d'ordre au niveau de la transition FFLO du 1$^{\text{er}}$ ordre est très proche d'un cosinus comme c'est le cas près du point tricritique. Cette hypothèse correspond à effectuer un développement de Fourier du paramètre d'ordre dont nous n'avons gardé dans la forme (4.27) que le fondamental.

Afin de vérifier la validité de notre hypothèse, nous allons ajouter la première harmonique non nulle du développement de Fourier du paramètre d'ordre. Nous montrerons que cette modification de la forme du paramètre d'ordre ne change pas notablement les résultats sur la transition FFLO. En particulier, l'amplitude de l'harmonique reste toujours petite.

Le paramètre d'ordre a maintenant la forme suivante :

$$\Delta(\mathbf{r}) = 2\Delta_1 \cos(\bar{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{r}) + 2\Delta_3 \cos(3\,\bar{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{r}). \tag{4.41}$$

Inversion matricielle

On revient aux équations reliant les coefficients des séries de Fourier donnant f, f^+ et g. Les équations (4.33) se généralisent en :

$$\begin{aligned} G_n &= \frac{\Delta_1}{n}[(n-1)D_{n-1} + (n+1)D_{n+1}] + \frac{\Delta_3}{n}[(n-3)D_{n-3} + (n+3)D_{n+3}], \\ D_n &= -\frac{\Delta_1}{\bar{\omega}^2 + (nQ)^2}(G_{n-1} + G_{n+1}) - \frac{\Delta_3}{\bar{\omega}^2 + (nQ)^2}(G_{n-3} + G_{n+3}). \end{aligned} \tag{4.42}$$

On a toujours $G_n \neq 0$ pour n pair et $D_n \neq 0$ pour n impair ainsi que les symétries $G_n = G_{-n}$ et $D_n = D_{-n}$ si bien que l'on peut se restreindre ici aussi aux $n \geq 0$. La relation de normalisation est toujours donnée par l'équation (4.34).

Sachant que $G_0 = 1$, on peut récrire les équations (4.42) sous la forme compacte matricielle :

$$\mathcal{M} \begin{pmatrix} D_1 \\ G_2 \\ D_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Delta_1 \\ 0 \\ -\Delta_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.43}$$

avec d'une façon générale : $\mathcal{M}(n, n \pm 1) = \Delta_1$, $\mathcal{M}(n, n \pm 3) = \Delta_3$, $\mathcal{M}(n, n) = \left[\bar{\omega}^2 + (nQ)^2\right]$ pour n pair strictement positif ; $\mathcal{M}(n, n) = n$, $\mathcal{M}(n, n \pm 1) = -(n \pm 1)\Delta_1$, $\mathcal{M}(n, n \pm 3) = -(n \pm 3)\Delta_3$ pour n impair positif. Les exceptions à ces formules générales sont $\mathcal{M}(1, 2) = \Delta_1 + \Delta_3$ et $\mathcal{M}(2, 1) = -\Delta_1 + \Delta_3$. $\mathcal{M}$ est une matrice infinie et on cherche une solution de ce système qui soit normalisable. On va donc procéder, comme dans la sous-section précédente, à une approximation consistant à annuler tous les coefficients au-delà de l'ordre $N_{\max}$. La matrice $\mathcal{M}$ est alors de dimension finie et on peut l'inverser numériquement afin de déterminer les coefficients non nuls et d'en déduire la valeur de g_0.

On généralise aisément la formule donnant l'énergie libre ainsi que l'équation du gap. Sa projection sur l'harmonique $3\bar{\mathbf{q}}$ donne notamment l'expression suivante :

$$\Delta_3 \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) = 2\pi t \sum_{n\geq 0} \left[\int_{S_F} d\tilde{\Omega}\, \mathrm{Re} f_3(\Delta_1, \Delta_3, \bar{q}, \theta, \omega_n) - \frac{\Delta_3}{\omega_n}\right]. \tag{4.44}$$

Résultats comparatifs

On compare les résultats de la maximisation de la température avec $\Delta_3 \neq 0$ et avec $\Delta_3 = 0$, c'est-à-dire avec et sans harmonique. Les résultats sont présentés dans les figures 4.2.

On déduit de cette étude qu'à proximité de la transition, même si celle-ci est du premier ordre, les harmoniques du paramètre d'ordre restent de faible amplitude et peuvent être négligées dans l'étude de la transition. On retrouve ainsi un résultat de l'étude du voisinage du point tricritique que l'on étend à toute température et pour un paramètre d'ordre unidimensionnel.

4.2.4 Conclusion

Nous avons détaillé dans cette section une méthode de développement de Fourier des équations quasiclassiques d'Eilenberger afin d'étudier la transition FFLO vers une phase inhomogène unidimensionnelle. On détermine ainsi un ensemble de solutions approchées des équations quasiclassiques qui converge très rapidement vers la solution exacte normalisée. Le paramètre d'ordre est lui-même développé en série de Fourier et on montre que le mode fondamental, correspondant à un $\cos(\bar{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{r})$, est suffisant pour décrire quantitativement la transition.

On trouve une transition du 1^{er} ordre qui devient du 2^{nd} ordre en dessous de $T/T_c^0 = 0.076$, conformément aux résultats de Matsuo *et coll.* [79]. Sachant que la transition FFLO à température nulle est du 1^{er} ordre pour de nombreuses formes du paramètre d'ordre [72], il est nécessaire d'étendre le développement de Fourier à des paramètres d'ordre tridimensionnels si l'on veut étudier le régime des basses températures.

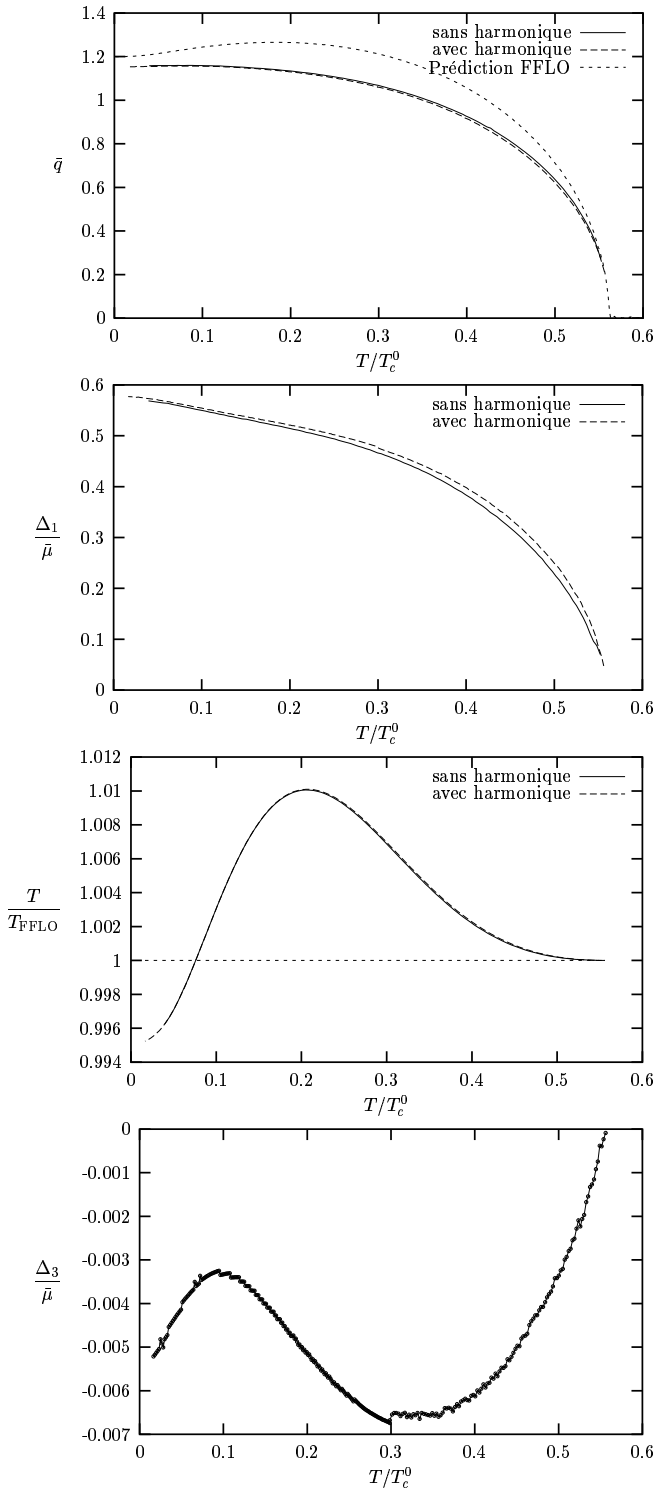


FIG. 4.2: Différences entre le calcul simplifié où le paramètre d'ordre est un simple $\cos(qx)$ et le calcul où l'on a ajouté une harmonique et où le paramètre d'ordre est de la forme (4.41). Le dernier graphe donne le résultat pour l'amplitude de l'harmonique Δ_3 en fonction de la température.

4.3 Somme de cosinus dans deux, trois ou quatre directions

Le principe de développement des fonctions f et g en séries de Fourier peut se généraliser à des formes plus complexes du paramètre d'ordre comme la somme de plusieurs cosinus. Prolongeant les conclusions au voisinage du point tricritique de la section 3.1, nous allons à nouveau faire l'hypothèse que les harmoniques sont petites (on le vérifiera pour la somme de deux cosinus) et qu'on peut les négliger dans l'étude de la transition FFLO. Le paramètre d'ordre appartient alors au sous-espace LO défini dans la section 3.1.

De même, on va se restreindre au cas particulier symétrique où les poids des différents cosinus ainsi que leurs périodes spatiales sont égaux. Il est tout à fait possible numériquement d'étudier le relâchement de ces contraintes, c'est-à-dire d'étudier la possibilité d'avoir des poids inégaux pour les cosinus ou des vecteurs d'onde de modules différents. Les calculs numériques correspondant que nous avons menés, quoique non exhaustifs, sont tels que les solutions symétriques sont toujours plus favorables. Par exemple, dans le cas d'une somme de deux cosinus, nous avons choisi un angle entre les vecteurs d'onde de $\pi/2$ ou $\pi/3$ et nous avons déterminé la ligne de transition (T/T_{FFLO}) en fonction de la température, en minimisant de façon indépendante les poids des deux cosinus. Dans les deux cas, nous avons obtenu que la forme optimale correspond à des poids égaux. Ces résultats sont d'ailleurs en accord avec les conclusions de notre étude de la transition FFLO à 2D (voir la section 3.2) ainsi qu'avec les conclusions du voisinage du point tricritique (voir la section 3.1).

Cette section est organisée de la manière suivante : on commence par expliquer la construction des solutions approchées aux équations d'Eilenberger pour un paramètre d'ordre qui est la somme de deux cosinus. On étudie ensuite la variation de la ligne de transition en fonction de l'angle entre les deux cosinus puis la modification de cette ligne lorsqu'on ajoute des harmoniques à la forme du paramètre d'ordre. On étend finalement cette construction à des paramètres d'ordre qui sont la somme de trois ou quatre cosinus de façon à déterminer les phases les plus stables énergétiquement à basse température.

4.3.1 Formalisme pour deux cosinus

Le paramètre d'ordre a la forme suivante :

$$\Delta(\mathbf{r}) = 2\Delta_1 \left[\cos(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}) + \cos(\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r})\right], \tag{4.45}$$

avec $|\mathbf{q}_1| = |\mathbf{q}_2| = \bar{q}$, leurs directions étant *a priori* différentes. Les développements en séries de Fourier des fonctions de Green f et g s'écrivent alors naturellement :

$$\begin{gathered} f(\mathbf{r}) = \sum_{n_1,n_2} f_{n_1,n_2} e^{i(n_1\bar{\mathbf{q}}_1 + n_2\bar{\mathbf{q}}_2)\cdot\mathbf{r}}, \qquad f^+(\mathbf{r}) = \sum_{n_1,n_2} f^+_{n_1,n_2} e^{i(n_1\bar{\mathbf{q}}_1 + n_2\bar{\mathbf{q}}_2)\cdot\mathbf{r}}, \\ g(\mathbf{r}) = \sum_{n_1,n_2} g_{n_1,n_2} e^{i(n_1\bar{\mathbf{q}}_1 + n_2\bar{\mathbf{q}}_2)\cdot\mathbf{r}}, \end{gathered} \tag{4.46}$$

et les coefficients dépendent maintenant de deux indices n_1 et n_2. La suite est semblable au cas d'un seul cosinus. La substitution des développements (4.46) dans les équations d'Eilenberger donne un système d'équations couplant les différents coefficients. On introduit $d_{n_1,n_2} = (f_{n_1,n_2} - f^+_{n_1,n_2})/2i$ de façon à écrire le système sous la forme :

$$d_{\{n\}} = -\frac{\kappa(\{n\})\Delta_1}{\bar{\omega}^2 + \kappa^2(\{n\})}(g_{n_1-1,n_2} + g_{n_1+1,n_2} + g_{n_1,n_2-1} + g_{n_1,n_2+1}), \tag{4.47a}$$

$$g_{\{n\}} = \frac{\Delta_1}{\kappa(\{n\})}(d_{n_1-1,n_2} + d_{n_1+1,n_2} + d_{n_1,n_2-1} + d_{n_1,n_2+1}), \tag{4.47b}$$

où $\{n\}$ désigne le doublet (n_1, n_2), $\bar{\omega} = \omega - i$ et $\kappa(\{n\}) = \hat{\mathbf{k}} \cdot (n_1\bar{\mathbf{q}}_1 + n_2\bar{\mathbf{q}}_2)$. On choisit les axes de telle sorte que $\bar{\mathbf{q}}_1$ soit le long de l'axe x et $\bar{\mathbf{q}}_2$ dans le plan (x, y) et faisant un angle α avec $\bar{\mathbf{q}}_1$. On a alors $\kappa(\{n\}) = \bar{q}\,(n_1\cos(\phi) + n_2\cos(\phi - \alpha))\sin\theta$; θ et ϕ sont les angles donnant la direction du vecteur $\hat{\mathbf{k}}$ sur la surface de Fermi.

Comme dans le cas unidimensionnel, on se restreint aux solutions de (4.47a) et (4.47b) telles que $d_{\{n\}} = 0$ pour $n_1 + n_2$ pair et $g_{\{n\}} = 0$ pour $n_1 + n_2$ impair. On peut donc attribuer aux noeuds d'un réseau carré paramétrés par les entiers n_1 et n_2 les valeurs des coefficients réels $d_{\{n\}}$ et $g_{\{n\}}$ selon que $n_1 + n_2$ est respectivement impair ou pair. Les équations (4.47a) et (4.47b) couplent ainsi chaque site à ses plus proches voisins. Il y a par conséquent une analogie formelle entre la résolution de ce système et celle d'une équation différentielle discrétisée sur un réseau. Dans le cas d'un seul cosinus dans la forme du paramètre d'ordre, le réseau est unidimensionnel. Si l'on a trois cosinus, le réseau sera tridimensionnel, etc. Cette équivalence à un problème sur réseau peut donc se généraliser à n'importe quelle somme de cosinus, la taille des matrices et la difficulté de la résolution numérique augmentant fortement avec le nombre de cosinus.

A l'instar du simple cosinus, on pose :

$$d_{\{n\}} = \kappa(\{n\})D_{\{n\}}g_0, \tag{4.48}$$

$$g_{\{n\}} = G_{\{n\}}g_0, \tag{4.49}$$

avec, par exemple, $G_0 = 1$. On obtient le système :

$$\begin{aligned} \left[\bar{\omega}^2 + \kappa^2(\{n\})\right] D_{\{n\}} + \Delta_1 \sum_{\{n_i\}\mathrm{ppv}\{n\}} G_{\{n_i\}} &= 0, \\ -\kappa(\{n\})G_{\{n\}} + \Delta_1 \sum_{\{n_i\}\mathrm{ppv}\{n\}} \kappa(\{n_i\})D_{\{n_i\}} &= 0, \end{aligned} \tag{4.50}$$

qui peut aussi s'écrire sous forme matricielle où l'on ordonne les coefficients suivant la valeur de $|n_1 + n_2|$ (la suite des coefficients dessine dans le réseau une spirale sortante centrée sur l'origine).

D'une façon générale, le système d'équations (4.50) possède plusieurs solutions linéairement indépendantes mais une seule solution, qui est la solution physique, est normalisable, c'est-à-dire que les valeurs des coefficients correspondant sont rapidement décroissantes loin du centre. Comme pour le cas unidimensionnel, on s'attend à ce qu'une coupure brutale annulant tous les coefficients au-delà

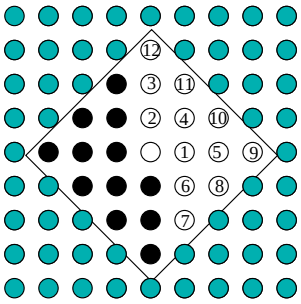


FIG. 4.3: Exemple de restriction du domaine étudié pour $N_{\max} = 3$. Les différents cercles représentent les noeuds du réseau, le carré indique la limite entre les coefficients nuls (à l'extérieur du carré, en gris) et les coefficients non nuls. Les symétries sur G et D permettent ensuite d'écrire un système d'équations fermé sur les points blancs. Les nombres indiquent l'ordre utilisé dans l'écriture matricielle du système (4.50).

d'une certaine distance à l'origine nous donne une solution proche de la solution normalisable, d'autant plus proche que la coupure est effectuée à grande distance. On note $N_{\max}$ cette coupure avec $G_{n_1,n_2} = 0$ et $D_{n_1,n_2} = 0$ pour $|n_1+n_2| > N_{\max}$. On se restreint de cette manière dans le réseau aux points situés à l'intérieur d'un carré de demi-diagonale $N_{\max}$. Par ailleurs, on peut utiliser les symétries $G_{-n_1,-n_2} = G_{n_1,n_2}$ et $D_{-n_1,-n_2} = D_{n_1,n_2}$ afin de se restreindre encore au domaine présenté figure 4.3. On note $\mathcal{D}$ ce domaine. Une fois la matrice inversée, on calcule g_0 selon :

$$g_0 = \left(1 + 2\sum_{\mathcal{D}} G^2_{\{n\}} + 2\sum_{\mathcal{D}} \left[\bar{\omega}^2 - \kappa^2(\{n\})\right] D^2_{\{n\}}\right)^{-1/2} . \qquad (4.51)$$

4.3.2 Résultats pour deux cosinus

Passage d'un cosinus à deux cosinus

La méthode pour trouver la position de la transition FFLO est la même que dans le cas d'un seul cosinus. L'énergie réduite en unité de $\bar{\mu}^2$ est notamment donnée par :

$$\frac{\Omega}{2} = 2\Delta_1^2 \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) + 2\pi t \sum_{n\geq 0} \int_{\omega_n}^{+\infty} d\omega \int_{S_F} d\tilde{\Omega} \left[\mathrm{Re}\, g_0(\omega, Q, \phi) - 1 + \frac{2\Delta_1^2}{\omega^2}\right] . \quad (4.52)$$

On calcule la position de la transition pour différentes valeurs de l'angle α entre 0 et $\pi/2$, voir figure 4.4. On rappelle que α est l'angle entre les vecteurs d'onde $\hat{\mathbf{q}}_1$ et $\hat{\mathbf{q}}_2$. Par construction du paramètre d'ordre, on a la symétrie $\alpha \to \pi - \alpha$ si bien que seules les valeurs de α comprises entre 0 et $\pi/2$ sont pertinentes. Selon la température, l'état de plus basse énergie est soit la forme planaire où le paramètre d'ordre est un simple cosinus, soit une somme de deux cosinus dans deux directions orthogonales. La transition entre les deux se fait de façon discontinue et sans états intermédiaires pour $T \simeq 0.154 T_c$ et les états d'angles différents de $\pi/2$ ne sont

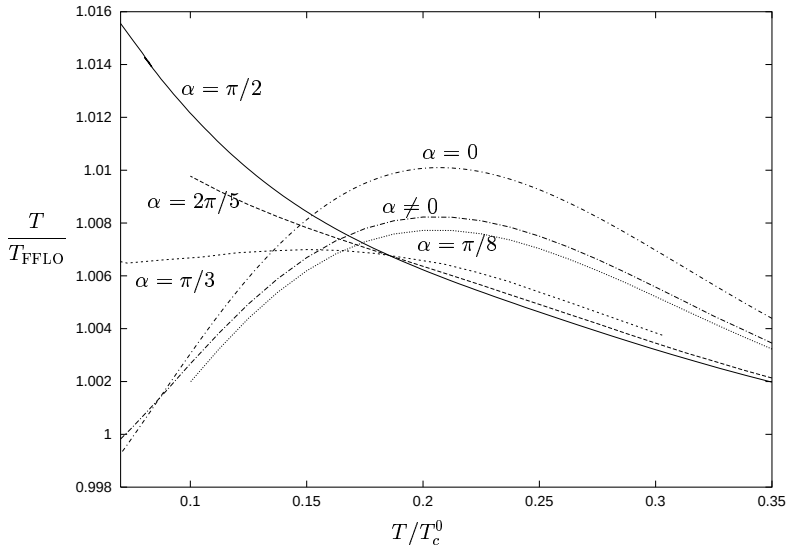


FIG. 4.4: Lignes de transition pour différents angles. $\alpha \neq 0$ correspond à un angle très petit mais non nul. $\alpha = 0$ correspond à un seul cosinus.

jamais les états de plus basse énergie. On note que la limite $\alpha \to 0$ ne redonne pas les résultats de la forme unidimensionnelle à un seul cosinus. On a déjà vu cet effet au voisinage du point tricritique : la séparation de deux fréquences spatiales, même infinitésimale, modifie l'énergie d'une quantité finie. On peut voir cet effet simplement dans la moyenne spatiale de la somme au carré de deux cosinus : $\langle[\cos(q_1 x) + \cos(q_2 x)]^2\rangle = 1 + \delta_{q_1,q_2}$, $\langle\rangle$ désignant la moyenne spatiale. Le résultat est singulier pour $q_1 = q_2$.

Sensibilité à la valeur de $N_{\max}$

Le calcul exact nécessite de choisir $N_{\max}$ infini ce qui est impossible d'un point de vue pratique. On calcule donc la ligne de transition pour $\alpha = \pi/2$ et pour différentes valeurs de $N_{\max}$, voir figure 4.5, afin d'étudier la convergence de la méthode. Le temps de calcul est d'autant plus long que $N_{\max}$ est grand et un calcul au-delà de $N_{\max} = 5$ n'est pas vraiment envisageable. On constate toutefois que $N_{\max} = 3$ est déjà largement suffisant pour déterminer la position de la transition. La solution approchée, pour $N_{\max}$ fini, converge donc plus vite vers la solution exacte que dans le cas d'un seul cosinus même si les temps de calcul sont sensiblement plus longs. Il faut en effet effectuer une double intégration angulaire (sur θ et ϕ) et le nombre de coefficients pour un $N_{\max}$ donné augmente rapidement avec le nombre de cosinus.

Les figures 4.6 donnent l'amplitude du paramètre d'ordre ainsi que le vecteur d'onde optimal en fonction de la température pour différentes valeurs de $N_{\max}$.

Harmoniques pour deux cosinus

On va vérifier dans ce paragraphe que les harmoniques du paramètre d'ordre n'ont pas d'effet significatif sur la description de la transition FFLO ; ceci dans le cas de la somme de deux cosinus. Le formalisme développé pour la somme de deux cosinus peut se généraliser sans difficulté au cas d'un paramètre d'ordre de la forme :

$$\Delta(\mathbf{r}) = 2\Delta_1 \left[\cos(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}) + \cos(\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r})\right] + 2\Delta_3 \left[\cos(3\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}) + \cos(3\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r})\right], \quad (4.53)$$

où Δ_3 est l'amplitude des premières harmoniques non nulles du paramètre d'ordre. Dans l'image géométrique du réseau, voir figure 4.3, les termes en Δ_3 couplent les noeuds du réseau distant de 3 unités suivant les directions des deux axes. On note ppv3 ce couplage (ppv1 correspondrait simplement aux plus proches voisins), on

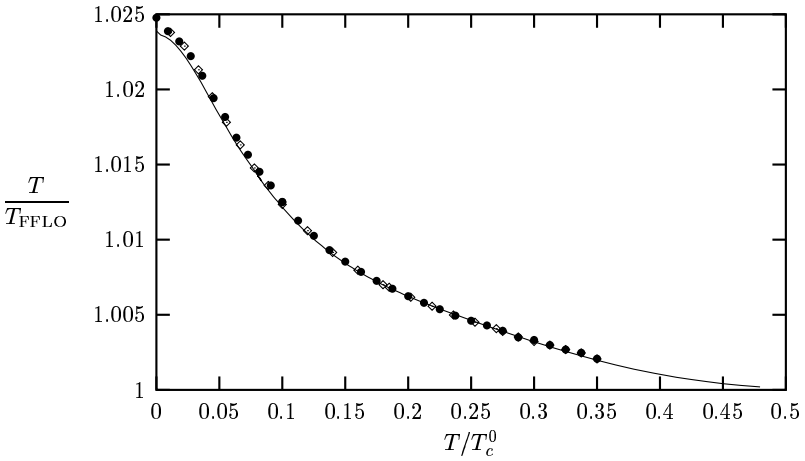


FIG. 4.5: Lignes de transition pour différentes valeurs de $N_{\max}$. La ligne pleine correspond à $N_{\max} = 3$, les ronds noirs • à $N_{\max} = 4$ et les losanges blancs ◊ à $N_{\max} = 5$. Les résultats pour $N_{\max} = 4$ et $N_{\max} = 5$ sont indistinguables.

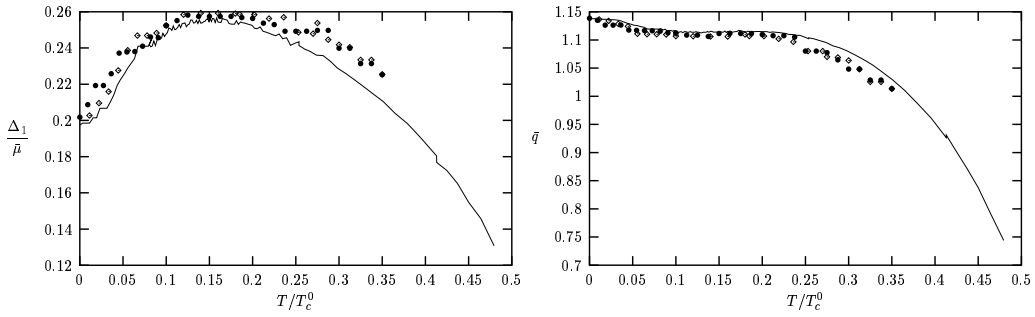


FIG. 4.6: Calculs pour différentes valeurs de $N_{\max}$ de l'amplitude Δ_1 et du vecteur d'onde optimal $\bar{q}$. $N_{\max} = 3$: ligne pleine ; $N_{\max} = 4$: ronds noirs ; $N_{\max} = 5$: losanges blancs.

obtient le système :

$$\begin{aligned}\left[\bar{\omega}^2+\kappa^2(\{n\})\right]D_{\{n\}}+\Delta_1\sum_{\{n_i\}\mathrm{ppv}\{n\}}G_{\{n_i\}}+\Delta_3\sum_{\{n_i\}\mathrm{ppv3}\{n\}}G_{\{n_i\}}=0,\\ -\kappa(\{n\})G_{\{n\}}+\Delta_1\sum_{\{n_i\}\mathrm{ppv}\{n\}}\kappa(\{n_i\})D_{\{n_i\}}+\Delta_3\sum_{\{n_i\}\mathrm{ppv3}\{n\}}\kappa(\{n_i\})D_{\{n_i\}}=0,\end{aligned} \tag{4.54}$$

et g_0 est toujours donné par (4.51). On compare figure 4.7 les résultats sans harmonique (résultats précédents avec $\Delta_3=0$) et les résultats avec harmoniques ($\Delta_3\neq 0$).

On constate, à l'instar du cas unidimensionnel, que l'amplitude des harmoniques est faible et qu'elle modifie peu les résultats sans harmoniques. On confirme ainsi l'approche initiale selon laquelle les solutions d'énergie minimale au voisinage de la transition sont proches de sommes finies de cosinus.

4.3.3 Formalisme et résultats pour trois cosinus

Le paramètre d'ordre a la forme suivante :

$$\Delta(\mathbf{r})=2\Delta_0\left[\cos(\mathbf{q}_1\cdot\mathbf{r})+\cos(\mathbf{q}_2\cdot\mathbf{r})+\cos(\mathbf{q}_3\cdot\mathbf{r})\right], \tag{4.55}$$

avec $|\mathbf{q}_1|=|\mathbf{q}_2|=|\mathbf{q}_3|=\bar{q}$. Le cas à trois cosinus n'est pas bien différent du cas à deux cosinus. Les coefficients de Fourier dépendent maintenant de trois entiers si bien que le passage sur réseau se fait dans un espace à trois dimensions. Ceci étant précisé, les équations sur les coefficients sont aussi données par le système (4.50) avec les définitions suivantes : $\{n\}$ représente le triplet (n_1,n_2,n_3), $\kappa(\{n\})=\hat{\mathbf{k}}\cdot(n_1\bar{\mathbf{q}}_1+n_2\bar{\mathbf{q}}_2+n_3\bar{\mathbf{q}}_3)$. On choisit les axes de telle sorte que $\bar{\mathbf{q}}_1$ soit suivant l'axe x, $\bar{\mathbf{q}}_2$ est dans le plan (x,y) et faisant un angle α avec $\bar{\mathbf{q}}_1$, la direction de $\bar{\mathbf{q}}_3$ est donnée par les angles θ_3 et ϕ_3. On a alors

$$\begin{aligned}\kappa(\{n\})=\bar{q}[&n_1\sin\theta\cos\phi+n_2\sin\theta\cos(\phi-\alpha)\\ &+n_3\left(\cos\theta\cos\theta_3+\sin\theta\sin\theta_3\cos(\phi-\phi_3)\right)].\end{aligned} \tag{4.56}$$

Le nombre de plus proches voisins est maintenant de 6 (dans un réseau à trois dimensions) et on limite le nombre de coefficients en annulant tous les coefficients tels que $|n_1+n_2+n_3|>N_{\max}$. On se restreint ainsi à l'intérieur d'un cube de demi-diagonale $N_{\max}$. Ici encore, on peut utiliser la parité des coefficients $G_{\{n\}}$ et $D_{\{n\}}$ afin d'écrire des équations fermées sur le sous-réseau défini par :

$$n_1>0\quad\text{ou}\quad(n_1=0\quad\text{et}\quad n_2>0)\quad\text{ou}\quad(n_1=0\quad\text{et}\quad n_2=0\quad\text{et}\quad n_3>0). \tag{4.57}$$

Les calculs numériques sont les mêmes que pour deux cosinus. L'énergie libre réduite est donnée par

$$\frac{\Omega}{2}=3\Delta_1^2\ln\left(\frac{T}{T_c}\right)+2\pi t\sum_{n\geq 0}\int_{\omega_n}^{+\infty}d\omega\int_{S_F}d\tilde{\Omega}\left[\mathrm{Re}g_0(\omega,Q,\theta,\phi)-1+\frac{3\Delta_1^2}{\omega^2}\right], \tag{4.58}$$

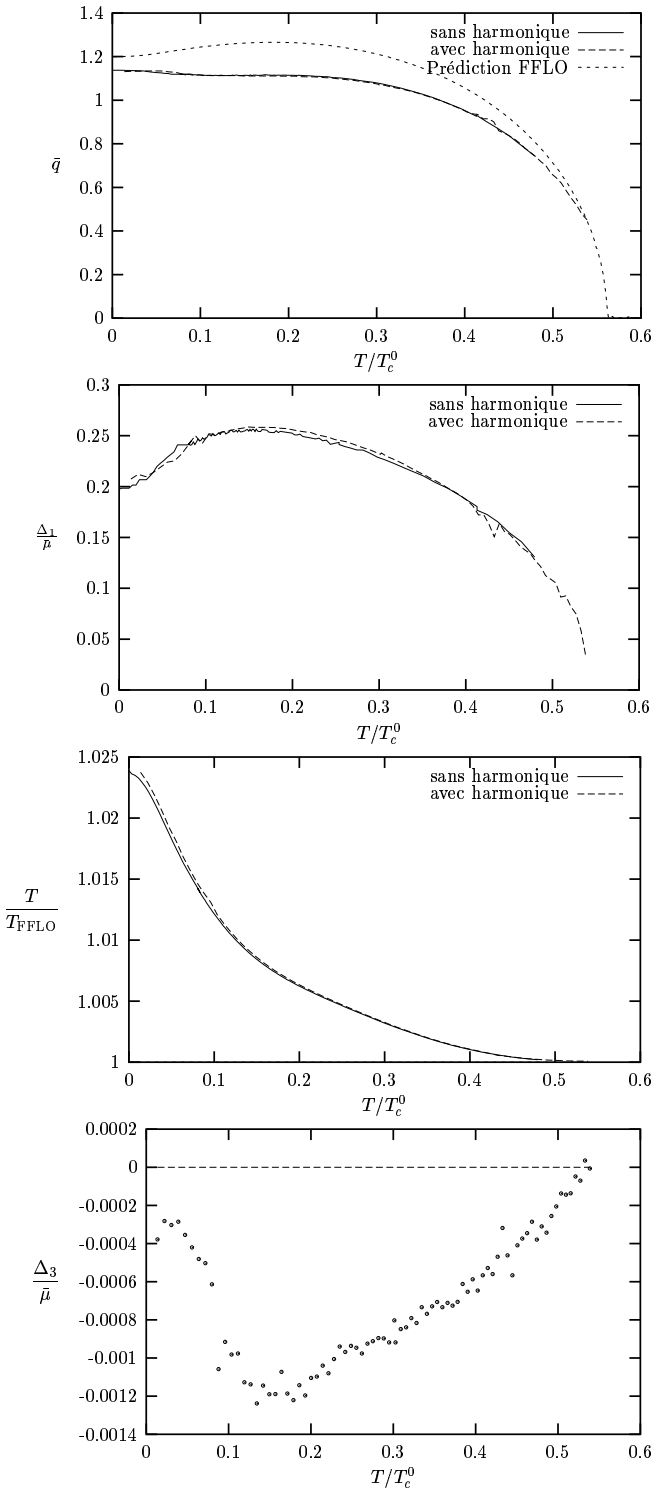


FIG. 4.7: Différences entre le calcul simplifié où le paramètre d'ordre est une somme de deux cosinus orthogonaux et le calcul où l'on a ajouté les premières harmoniques. Le dernier graphe en bas montre le résultat pour l'amplitude des harmoniques Δ_3 en fonction de la température.

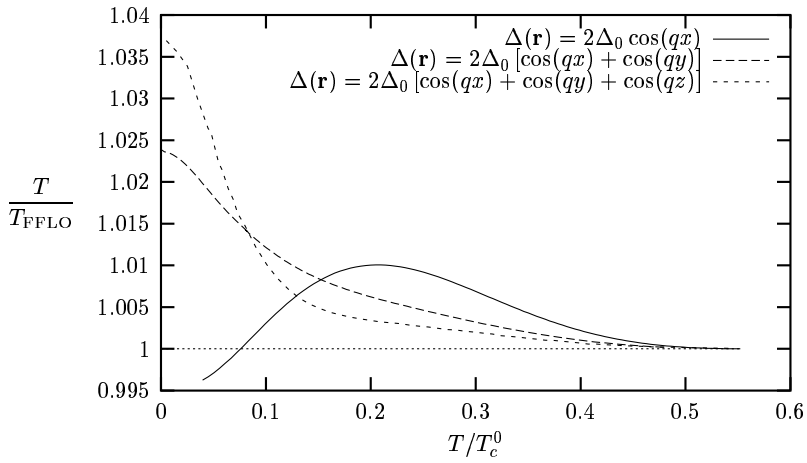


FIG. 4.8: Position de la transition du premier ordre entre l'état normal et l'état condensé inhomogène (phases FFLO) pour différentes structures du paramètre d'ordre.

et g_0 se calcule toujours selon l'équation (4.51).

Notre exploration numérique de la position de la transition FFLO en fonction des directions des trois cosinus nous a montré que le système se comporte, à basse température, comme s'il y avait une interaction répulsive entre les différentes directions des vecteurs d'onde du paramètre d'ordre, chaque cosinus correspondant à deux vecteurs d'onde opposés. Nous avons étudié par exemple la somme de trois cosinus dont les poids sont égaux, dont les directions ont la symétrie d'un rhomboèdre mais dont l'angle les séparant peut varier. La forme qui donne la ligne de transition la plus favorable à basse température est celle où les trois cosinus sont orthogonaux. L'énergie du système augmente dès lors que l'on rapproche deux cosinus. Cet effet est déjà celui constaté à basse température pour la solution à deux cosinus où l'état d'énergie minimale est réalisé lorsque les directions des cosinus sont orthogonales ($\alpha = \pi/2$).

Cette répulsion effective entre vecteurs d'onde nous a conduit à effectuer des calculs numériques sur la solution symétrique où les trois directions des cosinus sont orthogonales. Ceci correspond à $\bar{\mathbf{q}}_1$ suivant x, $\bar{\mathbf{q}}_2$ suivant y et $\bar{\mathbf{q}}_3$ suivant z. C'est la forme qui minimise l'effet de ces 'forces' répulsives.

Résultats numériques

La figure 4.8 présente la comparaison entre les solutions symétriques à un cosinus, deux cosinus et trois cosinus en fonction de la température. A mesure que la température décroît, la solution de plus basse énergie est d'abord le simple cosinus, puis la somme de deux cosinus, pour être finalement la somme de trois cosinus. Les transitions entre structures sont discontinues pour $T \simeq 0.154 T_c$ et $T \simeq 0.08 T_c$. Les autres résultats concernant la solution à trois cosinus sont présentés dans les figures 4.9 et 4.10. On constate que la coupure pour $N_{\max} = 3$ est suffisante pour calculer les caractéristiques de la transition.

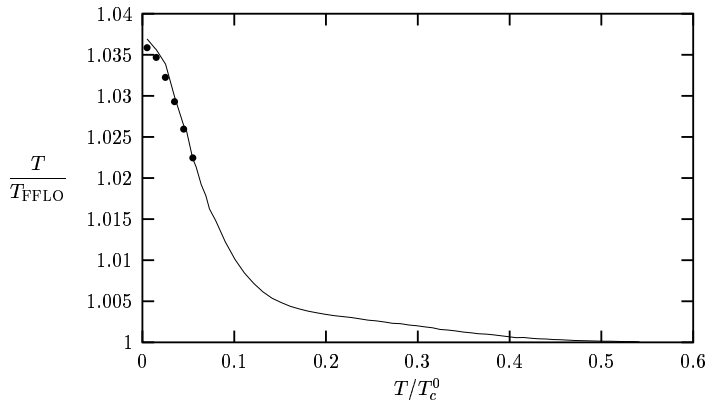


FIG. 4.9: Transition pour $N_{\max} = 3$ (ligne pleine) et $N_{\max} = 4$ (points noirs).

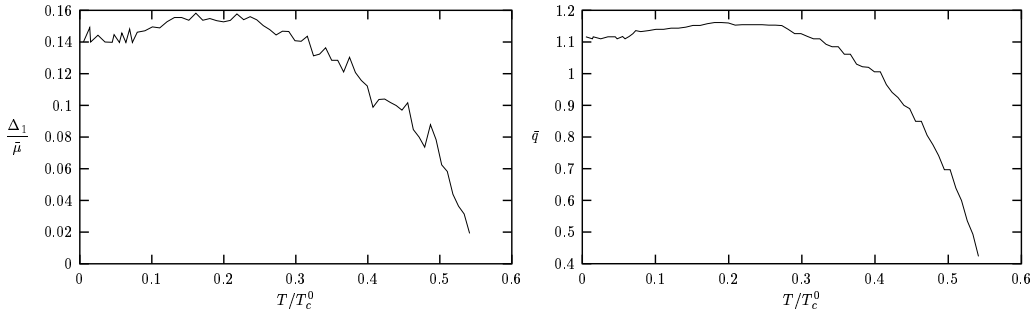


FIG. 4.10: Amplitude Δ_1 et vecteur d'onde optimal $\bar{q}$ en fonction de la température.

4.3.4 Somme de quatre cosinus

Notre méthode est généralisable à un nombre quelconque de cosinus. Toutefois la complexité des équations que l'on doit résoudre numériquement augmente très vite avec le nombre de cosinus. Nous avons vu qu'à basse température la solution à trois cosinus est plus stable que la solution à deux cosinus, elle-même plus stable que la solution à un cosinus. Il est par conséquent naturel d'envisager un scénario où augmenter encore le nombre de cosinus, à 4, 5, 6 ou plus, conduit à des structures encore plus stables. C'est le cas à 2D, comme nous l'avons vu dans la section 3.2, où, lorsque la température tend vers zéro, on obtient une cascade de transitions entre des formes du paramètre d'ordre ayant de plus en plus de cosinus.

Pour étudier cette éventualité à 3D, nous avons regardé la transition vers un paramètre d'ordre qui est la somme de quatre cosinus dont les directions sont symétriquement réparties vers les sommets d'un cube et dont les poids sont égaux. Cette structure est telle que l'angle entre les directions de deux cosinus les plus proches est toujours de 70.5°.

La méthode de résolution des équations d'Eilenberger est similaire à ce qu'on

a fait pour trois cosinus. Le paramètre d'ordre a la forme suivante :

$$\Delta(\mathbf{r}) = 2\Delta_1 \left[\cos(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}) + \cos(\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}) + \cos(\mathbf{q}_3 \cdot \mathbf{r}) + \cos(\mathbf{q}_4 \cdot \mathbf{r})\right], \tag{4.59}$$

avec $|\mathbf{q}_1| = |\mathbf{q}_2| = |\mathbf{q}_3| = |\mathbf{q}_4| = \bar{q}$. Les coefficients de Fourier dépendent de quatre entiers si bien qu'on retrouve les équations (4.50) dans un espace de dimension 4, avec $\{n\} = (n_1, n_2, n_3, n_4)$ et $\kappa(\{n\}) = \hat{\mathbf{k}} \cdot (n_1\bar{\mathbf{q}}_1 + n_2\bar{\mathbf{q}}_2 + n_3\bar{\mathbf{q}}_3 + n_4\bar{\mathbf{q}}_4)$. On cherche comme précédemment une solution approchée en annulant les coefficients au-delà d'un certain rang $N_{\max}$ ($|n_1 + n_2 + n_3 + n_4| > N_{\max}$). L'énergie réduite est donnée par :

$$\frac{\Omega}{2} = 4\Delta_1^2 \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) + 2\pi t \sum_{n\geq 0} \int_{\omega_n}^{+\infty} d\omega \int_{S_F} d\tilde{\Omega} \left[\mathrm{Re}\, g_0(\omega, Q, \theta, \phi) - 1 + \frac{4\Delta_1^2}{\omega^2}\right], \tag{4.60}$$

et g_0 par

$$g_0 = \left(1 + 2\sum_{\mathcal{D}} G^2_{\{n\}} + 2\sum_{\mathcal{D}} \left[\bar{\omega}^2 - \kappa^2(\{n\})\right] D^2_{\{n\}}\right)^{-1/2}. \tag{4.61}$$

La ligne de transition pour cette forme du paramètre d'ordre est représentée figure 4.11 où le calcul a été effectué avec la solution approchée $N_{\max} = 3$. On suppose que cette approximation est suffisante. On constate que cette forme du paramètre d'ordre ne donne jamais la solution de plus basse énergie même à très basse température. Ce résultat semble aller dans le sens de l'étude récente de Bowers et Rajagopal [72] qui prédit qu'augmenter le nombre de cosinus stabilise la phase condensée jusqu'à un nombre optimal de cosinus. Au-delà de ce nombre optimal, qui est 4 pour Bowers et Rajagopal et qui serait 3 pour nous, l'énergie augmente

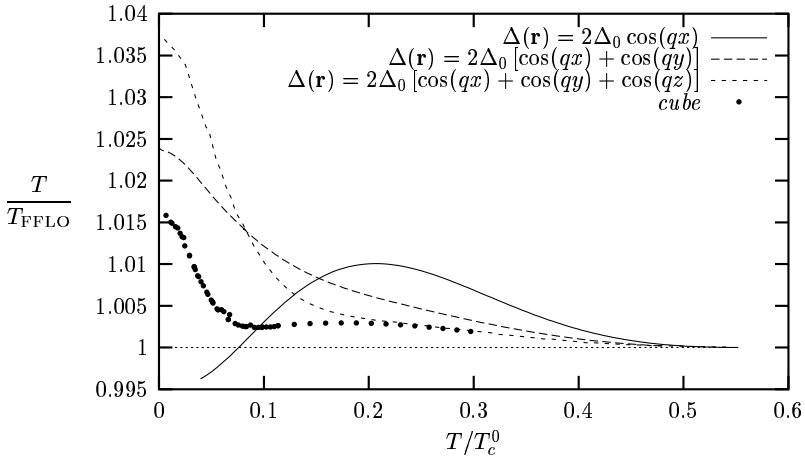


FIG. 4.11: Comparaison entre la forme du paramètre d'ordre appelée *cube* et donnée par (4.59) où les directions des vecteurs d'onde pointent vers les sommets d'un cube, et les trois formes orthogonales à 1, 2 et 3 cosinus, dans le calcul de la ligne de transition FFLO.

à nouveau lorsqu'on augmente le nombre de cosinus. Il semble important de souligner à ce stade que l'étude de Bowers et Rajagopal n'est pas quantitative comme la nôtre. Elle suppose que l'on peut décrire la transition avec un développement de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre, comme dans la théorie de Ginzburg-Landau, ce qui se justifie parfaitement pour une transition du second ordre mais pas pour une transition du premier ordre. Leurs prédictions sont par conséquent indicatives même si elles permettent probablement une bonne compréhension de la physique sous-jacente. Nous proposons dans la sous-section 4.4.2 de résoudre cette contradiction sur la forme de la structure optimale entre nos résultats et les prédictions de Bowers et Rajagopal dans l'esprit des considérations phénoménologiques de la section 3.3.

A la lumière de nos résultats à 2D, il apparaît naturel que l'augmentation du nombre de cosinus dans la forme du paramètre d'ordre soit défavorable au-delà d'un certain nombre. En effet, la cascade à 2D est liée au fait que l'énergie libre soit non analytique à température nulle alors qu'à 3D il n'y a pas de problème de non analyticité.

4.4 Compétition entre phases à basse température

On revient dans cette section sur l'étude de la compétition entre les différentes formes du paramètre d'ordre à basse température. Cette étude est particulièrement intéressante car elle permet la comparaison avec des approches cherchant à décrire directement l'état fondamental du système. Nous commencerons par examiner les réponses que fournissent les solutions approchées $N_{\max} = 1$. Nous verrons ensuite comment expliquer nos résultats de la section 4.3 dans le cadre des considérations phénoménologiques de la section 3.3, où l'on cherche à raisonner sur la structure de l'appariement.

4.4.1 Solutions approchées avec $N_{\max} = 1$

Les solutions approchées calculée avec $N_{\max} = 1$ ont le grand avantage de donner une expression analytique simple pour g_0. Pour un seul cosinus, elle est donnée par l'équation (4.40) et on peut évidemment la généraliser à la somme de n cosinus de poids Δ_i. On obtient :

$$g_0 = \left(1 + 2 \sum_{i=1}^{n} |\Delta_i|^2 \frac{\bar{\omega}^2 - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}_i)^2}{\left[\bar{\omega}^2 + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}_i)^2\right]^2} \right)^{-1/2} \tag{4.62}$$

où les $\mathbf{q}_i$ sont les vecteurs d'onde des cosinus. Le traitement numérique de ce type de solution est beaucoup plus simple que pour les solutions approchées d'ordres supérieurs ce qui permet un traitement plus systématique de la recherche des formes qui minimisent l'énergie.

Les question plus fondamentales de la validité de cette approximation et de sa pertinence qualitative sont bien sûr essentielles. On a vu que pour un paramètre d'ordre sinusoïdal et unidimensionnel, la solution approchée $N_{\max} = 1$ donne le bon comportement en fonction de la température mais n'est quantitativement

pas très bon. Pourtant, à basse température et pour des structures à 2, 3 et 4 cosinus, la solution $N_{\max} = 1$ est relativement proche du comportement exact. On le constate sur les figures 4.12. La compétition entre ces phases n'est pas toutefois pas convenablement reproduite puisque la phase *cube* se retrouve plus stable que la phase à deux cosinus (contrairement au calcul plus précis de la figure 4.11). On le voit sur la figure 4.13. La phase la plus stable reste malgré tout la phase à trois cosinus.

Par ailleurs, on retrouve pour les solutions approchées telle que $N_{\max} = 1$ les principes généraux qui minimisent l'énergie à basse température : les directions des ondes planes qui forment le paramètre d'ordre ont tendance à se repousser. On obtient ainsi des formes symétriques, les poids des différentes ondes planes tendent vers une même valeur, tout comme les normes des vecteurs d'onde.

L'approximation $N_{\max} = 1$ est donc très commode pour une exploration rapide du problème de minimisation de l'énergie. Elle donne une idée plutôt correcte de la compétition entre les différentes structures du paramètre d'ordre. Cependant, on ne peut pas s'y fier complètement. Tout d'abord parce que les prédictions sur la position de la transition FFLO sont quantitativement incorrectes. Ensuite parce

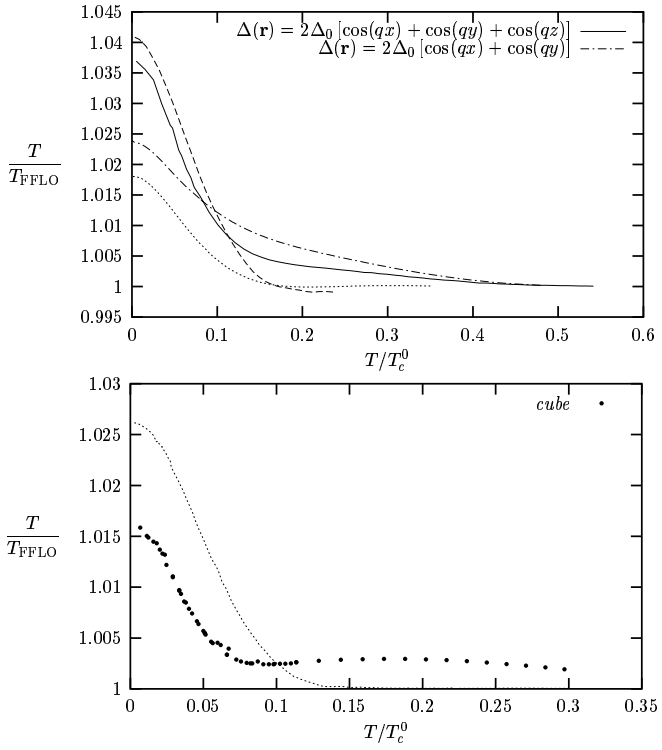


FIG. 4.12: Figure du haut : position comparée de la ligne de transition FFLO pour deux et trois cosinus entre le calcul exact (3 cosinus : ligne pleine, 2 cosinus : ligne tiret-points) et le calcul approché tel que $N_{\max} = 1$ (3 cosinus : tirets , 2 cosinus : ligne pointillés). Figure du bas : même chose pour la solution *cube* entre le calcul pour $N_{\max} = 3$ (points noirs) et le calcul pour $N_{\max} = 1$ (ligne pointillés).

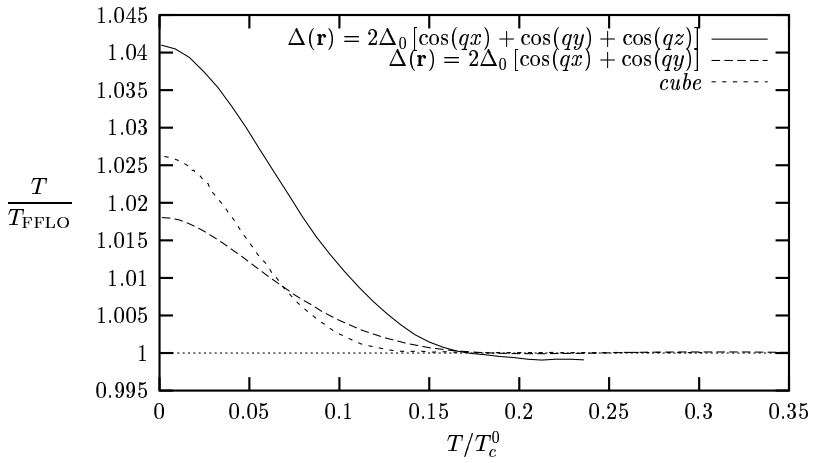


FIG. 4.13: On compare, dans le cadre de l'approximation $N_{\max} = 1$, les formes à trois cosinus et à deux cosinus avec la forme symétrique à quatre cosinus appelée *cube*.

que certaines prédictions peuvent aussi se révéler qualitativement incorrectes en changeant par exemple les conclusions concernant la comparaison de deux structures du paramètre d'ordre.

4.4.2 Appariement sur la sphère de Fermi

On revient maintenant sur les considérations physiques de la section 3.3 que l'on va chercher à relier à nos résultats exacts pour les lignes de transition FFLO ainsi qu'aux conclusions de Bowers et Rajagopal [72]. A température nulle, l'image physique heuristique de l'appariement est la suivante : lorsque l'amplitude du paramètre d'ordre tend vers zéro, on associe à chaque vecteur d'onde présent dans la forme du paramètre d'ordre un cercle sur la surface de Fermi. Ce cercle, dont l'ouverture angulaire à température nulle est $\psi_0 \simeq 67.1°$, correspond à une zone privilégiée d'appariement juste au voisinage de la surface de Fermi. La forme d'énergie minimale (c'est-à-dire la forme du paramètre d'ordre correspondant à l'état fondamental) s'obtient à l'aide des principes suivants :

- pour que l'appariement soit le plus efficace possible, il faut augmenter le nombre de cercles sur la surface de Fermi, donc augmenter le nombre d'ondes planes.
- d'un autre côté, le croisement entre deux cercles est très fortement défavorable énergétiquement.

Ces deux principes permettent de comprendre les résultats à température nulle de la figure 4.11. Pour minimiser l'énergie, on augmente le nombre de cosinus, donc le nombre d'ondes planes, dans la forme du paramètre d'ordre, jusqu'à ce que la surface de Fermi soit couverte de cercles disjoints. L'augmentation du nombre de cosinus devient défavorable dès lors que cela entraîne le croisement d'au moins deux cercles sur la surface de Fermi.

Lorsque les cercles ne se croisent pas, il semble y avoir une interaction effective entre eux, répulsive à petit angle et attractive à plus grand angle. Cette interaction

effective est apparente dans la forme de la fonction $J(\alpha)$ aussi bien à 3D, voir figure 2.3, qu'à 2D, voir figure 3.5. Elle peut expliquer le fait que les directions des vecteurs d'onde tendent à choisir des formes symétriques afin de minimiser l'énergie.

Cette image des cercles sur la surface de Fermi semble bien décrire la situation physique lorsque la transition est du second ordre. Nous avons pu dans la section 3.3 expliquer ainsi la cascade à basse température. De même, Bowers et Rajagopal, qui font comme si la transition était du second ordre et utilisent une approche de type Ginzburg-Landau, peuvent expliquer leurs résultats avec ce type de raisonnement intuitif. En particulier, la taille angulaire des cercles étant de $\psi_0 \simeq 67.1°$, on peut placer 9 cercles disjoints de cette taille sur la surface de Fermi. Préférant la forme à 8 ondes planes (notre solution *cube*) qui est plus symétrique, leur conclusion est que la solution à 8 ondes planes est énergétiquement la plus favorable à température nulle, résultat qu'ils obtiennent aussi à partir de leur étude de l'énergie de Ginzburg-Landau.

A 3D, la transition est du premier ordre et l'amplitude du paramètre d'ordre est non nulle. Nous avons vu (section 3.3) dans le cas de l'onde plane de Fulde-Ferrell que cela revenait à épaissir le cercle, celui-ci devenant un anneau d'épaisseur 2Δ. Les anneaux s'épaississant, ils prennent plus de place sur la surface de Fermi ce qui semble expliquer [5] pourquoi nous trouvons, à température nulle, une forme à trois cosinus pour la structure de plus basse énergie plutôt que la forme *cube* de Bowers et Rajagopal. Cette dernière structure devient même franchement défavorable énergétiquement puisqu'elle correspond à une intersection entre anneaux.

4.5 Conclusion

Nous avons étudié dans ce chapitre la transition FFLO du premier ordre à 3D, à l'aide d'un développement de Fourier des équations quasiclassiques d'Eilenberger. Notre première conclusion est que cette transition est faiblement du premier ordre conformément à ce que nous avions trouvé au voisinage du point tricritique (voir page 73 au chapitre 3). Par faiblement du premier ordre, on entend plusieurs choses. Tout d'abord la température critique de transition est très proche de ce qu'elle serait si la transition était du second ordre, c'est-à-dire que T/T_{FFLO} est proche de 1, comme on le constate sur les figures 4.1, 4.4, 4.5, 4.8 et 4.11.

Ensuite l'amplitude du paramètre d'ordre n'est pas importante sans être vraiment négligeable ce qui a de nombreux effets sur les caractéristiques de la transition. En particulier, la physique de l'appariement FFLO, qui privilégie une norme optimale pour les vecteurs d'onde apparaissant dans la forme du paramètre d'ordre, reste largement pertinente. Même si la transition est du premier ordre et que les équations décrivant la phase condensée sont non linéaires, la faible amplitude du paramètre d'ordre est telle que les non linéarités changent peu la

[5] la taille angulaire des cercles est de 67.1° comparée à une distance angulaire entre ondes planes, dans la forme *cube*, de 70.5°. L'épaississement des anneaux conduit donc assez rapidement à leur enchevêtrement.

forme du paramètre d'ordre par rapport à une transition du second ordre [6]. Les harmoniques sont par conséquent toujours négligeables et les fréquences spatiales fondamentales ont une norme de l'ordre du vecteur d'onde optimal FFLO (voir figures 4.2 et 4.7). On confirme donc dans ce chapitre pour les basses températures les conclusions que nous avions obtenues au voisinage du point tricritique sur les faiblesses des non linéarités (voir encore page 73 du chapitre 3).

La faible amplitude du paramètre d'ordre semble aussi expliquer la rapide convergence de notre méthode de développement de Fourier des équations quasi-classiques. En effet, le comportement asymptotique du développement, donné par l'équation (4.38), montre que notre développement ressemble à un développement en fonction de l'amplitude du paramètre d'ordre, chaque terme du développement provenant, en quelque sorte, d'une resommation. Le développement obtenu ne comporte pas les singularités du développement direct et converge rapidement pour des petits paramètres d'ordre.

Pour finir, nous avons comparé différentes formes du paramètre d'ordre correspondant à la somme de un, deux, trois ou quatre cosinus. La minimisation de l'énergie semble favoriser l'égalité des poids des cosinus ainsi que les normes des vecteurs d'onde conformément à nos résultats au voisinage du point tricritique. A basse température, nous avons constaté que les formes symétriques, c'est-à-dire les formes pour lesquelles les directions des vecteurs d'onde sont symétriquement réparties sur la sphère, sont aussi favorisées énergétiquement. En se déplaçant le long de la ligne de transition entre la température tricritique T_c et la température nulle, nous avons obtenu pour le paramètre d'ordre de plus basse énergie, une transition (du premier ordre) entre un et deux cosinus puis entre deux et trois cosinus, les directions des vecteurs d'onde étant orthogonales pour deux et trois cosinus.

Nous avons conclu en interprétant de nombreux résultats de nos calculs numériques à l'aide d'une méthode heuristique basée sur l'image des cercles d'appariement sur la sphère de Fermi.

[6] on rappelle que, dans le cas d'une transition du second ordre, le paramètre d'ordre est une somme d'ondes planes dont les vecteurs d'onde ont la même norme.

Conclusions et perspectives

On s'est intéressé aux résultats de la théorie BCS la plus simple en présence d'une différence dans les potentiels chimiques des deux états de spin de l'électron. Les phases de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov apparaissent alors comme une adaptation de la phase condensée BCS à cette contrainte qui tend à polariser le gaz d'électrons. En contrepartie, ces phases sont inhomogènes et elles brisent donc la symétrie d'invariance par translation. Dans la première partie de cette thèse, nous avons donc étudié en détail le voisinage de la ligne de transition entre l'état normal et les phases inhomogènes FFLO.

Le voisinage du point tricritique, où apparaissent ces phases FFLO, est propice à un développement de l'énergie libre et à un traitement théorique dans l'esprit de l'approche de Ginzburg-Landau. Dans notre cas, l'originalité du développement de l'énergie est qu'il s'applique aussi à une transition du premier ordre. On a ainsi mené dans ce domaine une étude analytique de la compétition entre différentes formes du paramètre d'ordre. On a abouti à un certain nombre de conclusions très utiles pour la généralisation à des situations plus complexes ou à des températures plus basses. On obtient en particulier que la transition est du second ordre à 2D et que la forme du paramètre d'ordre le plus stable au voisinage de la ligne de transition est un cosinus.

A 3D, la transition est du premier ordre même si elle conserve une caractéristique essentielle de l'instabilité FFLO de l'état normal : la sélection de vecteurs d'onde privilégiés dans les composantes de Fourier du paramètre d'ordre. Ces vecteurs d'onde sont situés sur une sphère dont le rayon dépend de la température. Par conséquent, on trouve que la forme la plus stable est *proche* d'un cosinus, c'est-à-dire que ses harmoniques sont très petites. La transition est elle-même faiblement du premier ordre car très proche de la ligne de l'instabilité FFLO de l'état normal.

Nous avons poursuivi notre travail à 2D et à plus basse température car la transition est toujours du second ordre si bien qu'un développement de l'énergie à la Ginzburg-Landau permet d'étudier la compétition entre phases inhomogènes au voisinage de la ligne de transition. Nous avons pu mettre en évidence la présence d'une cascade d'une infinité de transitions entre des formes de plus en plus complexes du paramètre d'ordre lorsque la température tend vers zéro. Nous avons montré le lien entre cette cascade et la non analyticité de l'énergie à température nulle, elle-même étant reliée au contact entre surfaces de Fermi dans le mécanisme d'appariement FFLO.

A 3D et à plus basse température, nous avons montré l'inefficacité d'un dé-

veloppement de l'énergie et nous avons dû abandonner une approche purement analytique. Pour décrire la phase condensée, nous avons mis au point une méthode de résolution des équations quasiclassiques d'Eilenberger basée sur un développement de Fourier de ces équations. Cette méthode est facilitée au voisinage de la ligne de transition par la faiblesse des harmoniques dans la forme du paramètre d'ordre. Nous avons constaté que cette dernière propriété obtenue au voisinage du point tricritique reste valable à plus basse température. On obtient finalement une transition faiblement du premier ordre. Pour le paramètre d'ordre donnant la phase la plus stable, on observe un passage, quand la température tend vers zéro, entre une forme à un, deux puis trois cosinus orthogonaux, cette dernière forme semblant être la phase la plus stable à température nulle.

Les extensions de ce travail et les perspectives d'étude des phases FFLO sont multiples. Comme nous nous sommes restreints au voisinage de la ligne de transition entre l'état normal et la phase condensée, on pourrait regarder plus en détail les compétitions entre phases inhomogènes plus à l'intérieur de la phase superfluide. Notre méthode de résolution des équations quasiclassiques peut donner un cadre à cette étude même si on peut craindre un allongement des temps de calcul à cause de l'importance que vont prendre les harmoniques dans la forme du paramètre d'ordre. Dans cette direction, il serait aussi intéressant de regarder la transition entre les phases inhomogènes FFLO et la phase homogène BCS. Il est peut-être aussi possible de généraliser le développement de Fourier à des développements sur d'autres bases de fonctions.

Dans le cadre des supraconducteurs, un certain nombre d'améliorations peuvent être apportées à notre travail. Les effets de liquides de Fermi vont probablement modifier les conclusions de la compétition entre phases inhomogènes. On peut aisément les inclure dans les équations quasiclassiques et notre développement de Fourier sera très certainement toujours efficace. Au-delà des indications qualitatives sur les effets des impuretés, on peut inclure celles-ci plus précisément dans le traitement théorique et étudier leur influence. Une autre modification consiste à prendre des surfaces de Fermi légèrement anisotropes pour voir les effets sur les phases FFLO. Pour finir, il faudrait considérer la compétition entre l'effet orbital et l'effet paramagnétique. On obtient alors une compétition très riche entre phases mélant des vortex et des inhomogénéités de type FFLO. Cette problématique est beaucoup plus ambitieuse et a déjà donné lieu de nombreux travaux.

Dans le cadre des atomes froids, les améliorations à apporter à notre travail sont de nature différente. En particulier, on peut se demander ce que devient la théorie BCS lorsque l'interaction entre atomes devient forte comme au voisinage d'une résonance de Feshbach. Il semble que ce sera le cas expérimentalement. Il y a aussi les effets du piège qui sont importants. Le profil de densité du gaz est inhomogène et c'est aussi le cas pour la différence de densités entre les deux états hyperfins. Par ailleurs, les phases FFLO sont très vraisemblablement sensibles aux conditions aux limites fixées par les bords du gaz et donc à la forme du piège. Ces problématiques n'ont pour l'instant jamais été considérées dans les travaux sur les phases FFLO.

Annexe A

Développement de l'énergie libre

On détaille dans cet appendice le développement de l'énergie libre dans l'amplitude et le gradient du paramètre d'ordre. Dans la sous-section 2.4.1, on montre comment développer l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre à partir de l'équation du gap. On peut appliquer cette méthode afin d'étendre le développement du paramètre d'ordre à l'ordre 6 en $\Delta(\mathbf{r})$ ce qui donne :

$$\Omega = \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{1}{\lambda} - J_2(|\mathbf{q}|)\right] |\Delta_{\mathbf{q}}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=\mathbf{q}_4} \bar{\mu}^2 J_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q}_4)\Delta^*_{\mathbf{q}_1}\Delta_{\mathbf{q}_2}\Delta^*_{\mathbf{q}_3}\Delta_{\mathbf{q}_4}$$
$$+\frac{1}{3} \sum_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_5=\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_4+\mathbf{q}_6} \bar{\mu}^4 J_6(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q}_4,\mathbf{q}_5,\mathbf{q}_6)\Delta^*_{\mathbf{q}_1}\Delta_{\mathbf{q}_2}\Delta^*_{\mathbf{q}_3}\Delta_{\mathbf{q}_4}\Delta^*_{\mathbf{q}_5}\Delta_{\mathbf{q}_6} \qquad (1.1)$$

où J_2 et J_4 sont donnés par les expressions (2.58) et (2.59). Dans cette expression, Ω est en unités de $\bar{\mu}^2$ et les $\Delta_{\mathbf{q}_i}$ en unités de $\bar{\mu}$. Le calcul de J_6 donne, quant à lui :

$$J_6(\{\mathbf{q}_i\}_{i=1,6}) = -\frac{T}{N_0}\sum_{n,\mathbf{k}} \bar{G}(\mathbf{k})G(\mathbf{q}_1-\mathbf{k})\bar{G}(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)\times$$
$$\times G(-\mathbf{k}+\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3)\bar{G}(\mathbf{k}+\mathbf{q}_5-\mathbf{q}_6)G(\mathbf{q}_6-\mathbf{k}). \qquad (1.2)$$

Développement de J_6

Le travail consiste maintenant à développer chacun des termes de l'expression (1.1) en fonction du gradient du paramètre d'ordre, c'est-à-dire en fonction des $\mathbf{q}_i$. Le premier terme est développé à l'ordre 4 en $\mathbf{q}$. Il est suffisant pour le second terme qui est déjà d'ordre 4 dans l'amplitude du paramètre d'ordre d'effectuer le développement à l'ordre 2 en $\mathbf{q}$. De même, le dernier terme est développé à l'ordre zéro en $\mathbf{q}$. Pour ce dernier terme, l'ordre zéro donne :

$$J_6(\{\mathbf{q}_i\}=\mathbf{0}) = -\frac{T}{N_0}\sum_{n,\mathbf{k}} \bar{G}^3(\mathbf{k})G^3(-\mathbf{k}). \qquad (1.3)$$

On effectue l'intégration sur les vecteurs d'onde au voisinage de la surface de Fermi : $\sum_{\mathbf{k}} = N_0 \int d\xi \int d\tilde{\Omega}$. Le calcul intermédiaire :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{(i\bar{\omega}_n-\xi)^3(-i\bar{\omega}_n-\xi)^3} = \frac{3\pi\,\mathrm{sgn}(\omega_n)}{8\,\bar{\omega}_n^5}, \qquad (1.4)$$

où $\bar{\omega}_n = \omega_n - i\bar{\mu}$, conduit au résultat :

$$J_6(\{\mathbf{q}_i\} = \mathbf{0}) = -\frac{3}{4}\pi T \,\mathrm{Re} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{(\omega_n - i\bar{\mu})^5} \tag{1.5}$$

où l'on a utilisé le fait que $\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathrm{sgn}(\omega_n)/\bar{\omega}_n^p = 2\mathrm{Re}\sum_{n=0}^{+\infty} 1/\bar{\omega}_n^p$ pour p impair. Finalement, on trouve $\bar{\mu}^4 J_6(\{\mathbf{q}_i\} = \mathbf{0}) = 3a_4(\bar{\mu}/T)/8$, $a_4(\bar{\mu}/T)$ étant donné par l'expression (2.33), ce qui conduit bien au dernier terme de l'équation (2.65).

Développement du terme d'ordre 2 en Δ

On développe $1/\lambda - J_2(|\mathbf{q}|)$ à l'ordre 4 en $\mathbf{q}$. Les termes d'ordre impair du développement étant toujours nuls, on les omet dans le calcul. On obtient :

$$\bar{G}(\mathbf{k})G(\mathbf{q}-\mathbf{k}) = \frac{1}{(-i\bar{\omega}_n - \xi)(i\bar{\omega}_n - \xi + 2\kappa)} \simeq \bar{G}(\mathbf{k})G(\mathbf{k}) + 4\kappa^2\bar{G}(\mathbf{k})G^3(\mathbf{k}) + 16\kappa^4\bar{G}(\mathbf{k})G^5(\mathbf{k}) \tag{1.6}$$

où l'on a posé $\kappa = \hbar^2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}/2m$ qui peut se récrire $\kappa = \bar{\mu}\,\bar{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{k}}$, $\hat{\mathbf{k}}$ est le vecteur unitaire donnant la direction de $\mathbf{k}$ sur la surface de Fermi. On utilisera ici et pour la suite, la notation $\bar{\mathbf{q}}$ pour les vecteurs d'onde adimensionnés selon $\bar{\mathbf{q}} = \hbar v_F\,\mathbf{q}/2\bar{\mu}$ (voir notamment (1.26)). L'intégration sur $\mathbf{k}$ se fait au voisinage de la surface de Fermi et se sépare en une intégration sur l'angle et une intégration sur ξ. L'intégration angulaire dépend de la dimension. A 3D, elle donne :

$$\int d\tilde{\Omega}\,\kappa^2 = \bar{\mu}^2 \int d\tilde{\Omega}\,(\bar{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{k}})^2 = \bar{\mu}^2\,\frac{\bar{\mathbf{q}}^2}{3} \tag{1.7}$$

$$\int d\tilde{\Omega}\,\kappa^4 = \bar{\mu}^4 \int d\tilde{\Omega}\,(\bar{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{k}})^4 = \bar{\mu}^4\,\frac{\bar{\mathbf{q}}^4}{5} \tag{1.8}$$

Les intégrations par parties $\int d\xi \bar{G}G^3 = -(1/2)\int d\xi \bar{G}^2G^2$ et $\int d\xi \bar{G}G^5 = (1/6)\int d\xi \bar{G}^3G^3$ conduisent finalement au développement suivant :

$$\frac{1}{N_0}\sum_{\mathbf{k}} \bar{G}(\mathbf{k})G(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \simeq \int d\xi \bar{G}G - \frac{2\bar{\mu}^2\bar{\mathbf{q}}^2}{3}\int d\xi \bar{G}^2G^2 + \frac{8\bar{\mu}^4\bar{\mathbf{q}}^4}{15}\int d\xi \bar{G}^3G^3. \tag{1.9}$$

L'ordre le plus bas en $\mathbf{q}$ du terme d'ordre 2 en Δ est $1/\lambda - (T/N_0)\sum_n \int d\xi \bar{G}G$, c'est-à-dire $a_0(\bar{\mu}, T)$ défini dans l'équation (2.31).

Pour les ordres suivant en $\mathbf{q}$, on commence par dériver les expressions :

$$\bar{\mu}^2\,\frac{T}{N_0}\sum_{n,\mathbf{k}} \bar{G}^2(\mathbf{k})G^2(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}a_2(\bar{\mu}/T) \tag{1.10}$$

$$\bar{\mu}^4\,\frac{T}{N_0}\sum_{n,\mathbf{k}} \bar{G}^3(\mathbf{k})G^3(\mathbf{k}) = -\frac{3}{8}a_4(\bar{\mu}/T) \tag{1.11}$$

en utilisant le même calcul que pour J_6, les expressions de a_2, (2.32), et a_4, (2.33), ainsi que la formule :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{(i\bar{\omega}_n - \xi)^2(-i\bar{\omega}_n - \xi)^2} = \frac{\pi\,\mathrm{sgn}(\omega_n)}{2\,\bar{\omega}_n^3}. \tag{1.12}$$

Finalement, on effectue la sommation sur les fréquences de Matsubara de l'expression (1.9) et on obtient, à l'aide des formules (1.10) et(1.11), le développement :

$$\frac{1}{\lambda} - J_2(|\mathbf{q}|) \simeq a_0 - \frac{1}{3}a_2\bar{\mathbf{q}}^2 + \frac{1}{5}a_4\bar{\mathbf{q}}^4 \tag{1.13}$$

ce qui correspond bien au terme attendu dans l'équation (2.65).

Développement de J_4

Il reste à développer J_4 à l'ordre 2 en $\mathbf{q}$ de façon à faire apparaître le couplage entre vecteurs d'onde. A l'ordre zéro en $\mathbf{q}$, l'expression de J_4 (2.59) se calcule simplement avec la formule (1.10) et donne $(-1/2)a_2(\bar{\mu}/T)$.

Pour l'ordre suivant, on écrit :

$$\begin{aligned}\bar{G}(\mathbf{k})G(\mathbf{q}_1-\mathbf{k})\bar{G}(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)G(\mathbf{q}_4-\mathbf{k}) = \\ \frac{1}{(-i\bar{\omega}_n-\xi)(i\bar{\omega}_n-\xi+2\kappa_1)}\frac{1}{(-i\bar{\omega}_n-\xi+2(\kappa_1-\kappa_2))(i\bar{\omega}_n-\xi+2\kappa_4)} \simeq \\ \bar{G}^2G^2 + (4\kappa_1^2+4\kappa_4^2+4\kappa_1\kappa_4)\bar{G}^2G^4 + 4(\kappa_1-\kappa_2)^2\bar{G}^4G^2 \\ + 4(\kappa_1-\kappa_2)(\kappa_1+\kappa_4)\bar{G}^3G^3\end{aligned} \tag{1.14}$$

Le terme d'ordre 2 en $\mathbf{q}$ de cette expression peut se récrire après intégration par parties des termes $\int d\xi\, \bar{G}^{3-p}\bar{G}^{3+p}$ en $\int d\xi\, \bar{G}^3\bar{G}^3$:

$$-\frac{4}{3}\left[2\kappa_1^2+2\kappa_4^2+2\kappa_1\kappa_4+2(\kappa_1-\kappa_2)^2-3(\kappa_1-\kappa_2)(\kappa_1+\kappa_4)\right]\bar{G}^3G^3 \tag{1.15}$$

L'intégration angulaire (1.7) se généralise au cas d'un produit de deux κ_i :

$$\int d\tilde{\Omega}\,\kappa_1\kappa_2 = \bar{\mu}^2\int d\tilde{\Omega}\,(\bar{\mathbf{q}}_1\cdot\hat{\mathbf{k}})(\bar{\mathbf{q}}_2\cdot\hat{\mathbf{k}}) = \bar{\mu}^2\,\frac{\bar{\mathbf{q}}_1\cdot\bar{\mathbf{q}}_2}{3}. \tag{1.16}$$

Ainsi, si l'on pose :

$$\Gamma = 2\bar{\mathbf{q}}_1^2+2\bar{\mathbf{q}}_4^2+2\bar{\mathbf{q}}_1\bar{\mathbf{q}}_4+2(\bar{\mathbf{q}}_1-\bar{\mathbf{q}}_2)^2-3(\bar{\mathbf{q}}_1-\bar{\mathbf{q}}_2)\cdot(\bar{\mathbf{q}}_1+\bar{\mathbf{q}}_4), \tag{1.17}$$

et qu'on utilise la formule (1.11), on montre que le terme d'ordre 2 en $\mathbf{q}$ de J_4 est égal à $(1/3)(-4/3)(-3/8)\,\Gamma\,a_4\,(\bar{\mu}/T) = (1/6)\,\Gamma\,a_4(\bar{\mu}/T)$.

Notons que Γ peut se récrire selon :

$$\Gamma = \bar{\mathbf{q}}_1^2+\bar{\mathbf{q}}_4^2+(\bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4)\cdot(2\bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4-\bar{\mathbf{q}}_1). \tag{1.18}$$

En utilisant la conservation des moments $\bar{\mathbf{q}}_1+\bar{\mathbf{q}}_3 = \bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4$, on choisit d'écrire $(\bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4)\cdot(2\bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4-\bar{\mathbf{q}}_1) = (\bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4)\cdot(\bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_3) = (\bar{\mathbf{q}}_2+\bar{\mathbf{q}}_4)\cdot\bar{\mathbf{q}}_2+(\bar{\mathbf{q}}_1+\bar{\mathbf{q}}_3)\cdot\bar{\mathbf{q}}_3 = \bar{\mathbf{q}}_2^2+\bar{\mathbf{q}}_2\cdot\bar{\mathbf{q}}_4+\bar{\mathbf{q}}_3^2+\bar{\mathbf{q}}_1\cdot\bar{\mathbf{q}}_3$ ce qui est la formule souhaitée conduisant au développement final (2.65).

Annexe B

Calcul des fonctions $J(\alpha)$ et $\tilde{J}(\alpha)$ à 2D

B.1 Calcul de $J(\alpha)$

La formule générale donnant $J(\alpha)$ est l'expression (2.63), α étant l'angle entre les deux vecteurs d'onde $\mathbf{q}_1$ et $\mathbf{q}_2$. Précisons que dans le cadre dans lequel on calcule $J(\alpha)$, les vecteurs d'onde $\mathbf{q}_1$ et $\mathbf{q}_2$ ont la même norme.

L'intégration est effectuée au voisinage de la surface de Fermi. Comme décrit dans la sous-section 1.3.2, on sépare l'intégration entre une intégration angulaire et une intégration sur ξ et on écrit : $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \simeq \xi_{\mathbf{k}} + \hbar^2 \mathbf{k}\cdot\mathbf{q}/m$ avec $\mathbf{k} = k_F \hat{\mathbf{k}}$ ($\hat{\mathbf{k}}$ est unitaire). Comme dans l'annexe A, on pose $\kappa = \hbar^2 \mathbf{k}\cdot\mathbf{q}/2m$ ce qui peut se récrire $\kappa = \bar{\mu}\,\bar{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{k}}$. Finalement, on a :

$$J(\alpha) = T\sum_n < \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{(-i\bar{\omega}_n - \xi - 2\kappa_1)(-i\bar{\omega}_n - \xi - 2\kappa_2)(i\bar{\omega}_n - \xi)^2} > \qquad (2.1)$$

où $< \cdots >$ désigne l'intégration angulaire $\int_{S_F} d\tilde{\Omega}\cdots$. L'intégration de cette expression sur la variable ξ est simplement effectuée dans le plan complexe. On entoure le double pôle $\xi = i\bar{\omega}_n$ en ajoutant le reste du contour à l'infini qui donne une contribution nulle. On obtient deux contributions qu'on écrit :

$$J(\alpha) = 2i\pi T\sum_n < \frac{\mathrm{sgn}(\omega_n)}{(2i\bar{\omega}_n + 2\kappa_1)^2(2i\bar{\omega}_n + 2\kappa_2)} + 1 \leftrightarrow 2 > . \qquad (2.2)$$

L'égalité $(i\bar{\omega}_n)^* = -i\bar{\omega}_n^* = i\bar{\omega}_{-n}$ permet de récrire $J(\alpha)$ sous la forme :

$$J(\alpha) = \frac{1}{2}\pi T\,\mathrm{Im}\sum_{n=0}^{+\infty} < \frac{1}{(i\bar{\omega}_n + \kappa_1)^2(i\bar{\omega}_n + \kappa_2)} + 1 \leftrightarrow 2 > . \qquad (2.3)$$

Si l'on veut étudier le problème à basse température, il est plus commode de remplacer la somme sur les fréquences de Matsubara par une intégrale dans le plan complexe. La méthode est classique : si $f(z)$ est une fonction à valeurs dans le plan complexe qui décroît suffisamment à l'infini, alors on peut écrire :

$$4i\pi\, T\sum_{n>0} f(i\omega_n) = \int_{\mathcal{C}} f(z)\tanh\left(\frac{z}{2T}\right). \qquad (2.4)$$

On part d'un contour $\mathcal{C}$ qui entoure simplement les pôles $i\omega_n$ ($n > 0$) de la fonction $\tanh(z/2T)$ puis on déforme ce contour en évitant les singularités de la fonction $f(z)$. Les pôles de $f(z)$ étant sur l'axe réel, on peut déformer $\mathcal{C}$ en un demi-cercle dont la portion droite est juste au-dessus de l'axe réel et dont la partie courbée est à l'infini dans le demi-plan supérieur. Cette dernière contribution tend vers zéro lorsqu'on fait tendre la taille du demi-cercle vers l'infini. On obtient en conclusion :

$$J(\alpha) = -\frac{1}{8}\mathrm{Re}\left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tanh(z/2T)}{(z+\bar{\mu}+\kappa_1)^2(z+\bar{\mu}+\kappa_2)} + 1 \leftrightarrow 2 \right\rangle \tag{2.5}$$

l'intégration étant effectuée juste au-dessus de l'axe réel. Après intégration par partie, cette expression se simplifie en [1] :

$$J(\alpha) = -\frac{1}{16\,T}\mathrm{Re}\left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{\cosh^2(z/2T)} \frac{1}{(z+\bar{\mu}-\kappa_1)(z+\bar{\mu}-\kappa_2)} \right\rangle. \tag{2.6}$$

Afin d'expliciter et de transformer cette expression on choisit l'axe de référence comme étant la bissectrice des vecteurs $\bar{\mathbf{q}}_1$ et $\bar{\mathbf{q}}_2$ et on nomme θ l'angle entre cette référence et $\hat{\mathbf{k}}$. De cette façon, on a $\kappa_{1,2} = \bar{\mu}\bar{q}\cos(\theta \pm \alpha/2)$. Avec le changement de variable : $Y = (1 + z/\bar{\mu})/\bar{q}$, on trouve :

$$16t\bar{q}\bar{\mu}^2 J(\alpha) = -\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{+\infty} dY \frac{1}{\cosh^2((\bar{q}Y-1)/2t)}\ \mathcal{K}(Y) \tag{2.7}$$

où $t = T/\bar{\mu}$ et avec

$$\mathcal{K}(Y) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{1}{[\cos(\theta-\alpha/2)-Y].[\bar{q}\cos(\theta+\alpha/2)-Y]} \tag{2.8}$$

Pour calculer $\mathcal{K}(Y)$, on pose $z = e^{i\theta}$, l'intégration étant maintenant dans le plan complexe sur le cercle de rayon unité. Pour $|Y| > 1$, seules valeurs pour lesquelles $\mathcal{K}(Y)$ contribue à la partie réelle de l'intégrale dans (2.7), les pôles de la fonction intégrée sont : $z = e^{\pm i\alpha/2}(Y \pm \sqrt{Y^2-1})$. Le calcul donne

$$\mathcal{K}(Y) = \frac{Y}{(Y^2-\cos^2(\alpha/2))\sqrt{Y^2-1}}, \tag{2.9}$$

la coupure de la racine étant choisie de telle façon que $\sqrt{Y^2-1} = -\sqrt{|Y|^2-1}$ pour $Y < -1$. Le résultat final est l'équation (3.29).

B.2 Calcul de $\tilde{J}(\alpha)$

Le calcul de $\tilde{J}(\alpha)$ est très semblable à celui de $J(\alpha)$ et on ne va en détailler que les étapes principales. Avec les mêmes notations que précédemment, on a :

$$\tilde{J}(\alpha) = T\sum_n < \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{(-i\bar{\omega}_n-\xi)(-i\bar{\omega}_n-\xi+2(\kappa_2+\kappa_1))} \times \\ \times \frac{1}{(i\bar{\omega}_n-\xi+2\kappa_1)(i\bar{\omega}_n-\xi+2\kappa_2)} > \tag{2.10}$$

[1] par symétrie, on peut changer κ_1 en $-\kappa_1$ et/ou κ_2 en $-\kappa_2$.

qu'on intègre autour de $\xi = i\bar{\omega}_n + 2\kappa_1$ et $\xi = i\bar{\omega}_n + 2\kappa_2$. On obtient, après quelques manipulations :

$$\tilde{J}(\alpha) = -16\pi T \,\mathrm{Im} \sum_{n=0}^{\infty} < \frac{i\bar{\omega}_n}{[(2i\bar{\omega}_n)^2 - (\mathbf{k}.\mathbf{q}_1/m)^2].[(2i\bar{\omega}_n)^2 - (\mathbf{k}.\mathbf{q}_2/m)^2]} > . \tag{2.11}$$

L'application de la formule (2.4) à cette expression nous conduit à une réécriture où la somme sur les fréquences est remplacée par une intégrale :

$$\tilde{J}(\alpha) = -\frac{1}{4}\mathrm{Re}\left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{(z+\bar{\mu})\tanh(z/2T)}{((z+\bar{\mu})^2 - \kappa_1^2)((z+\bar{\mu})^2 - \kappa_2^2)} \right\rangle \tag{2.12}$$

qu'on peut ici encore récrire sous la forme :

$$4\bar{\mu}^2\bar{q}^2\tilde{J}(\alpha) = -\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{+\infty} dY \tanh((\bar{q}Y-1)/2t)\, Y\, \tilde{\mathcal{K}}(Y) \tag{2.13}$$

avec

$$\tilde{\mathcal{K}}(Y) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{1}{[\cos^2(\theta-\alpha/2) - Y^2].[\cos(\theta+\alpha/2)^2 - Y^2]}. \tag{2.14}$$

Pour calculer $\tilde{\mathcal{K}}(Y)$, on intègre sur le cercle unité dans le plan complexe en posant $z = e^{i\theta}$. Le calcul, assez lourd, conduit à l'expression :

$$\tilde{\mathcal{K}}(Y) = \frac{1}{2Y\sqrt{Y^2-1}}\left(\frac{1}{Y^2 - \cos^2(\alpha/2)} + \frac{1}{Y^2 - \sin^2(\alpha/2)}\right), \tag{2.15}$$

le second terme dans l'intégrale peut s'obtenir à partir du premier par le changement $\alpha \to \pi - \alpha$. On peut finalement écrire $\tilde{J}(\alpha) = \tilde{J}_o(\alpha) + \tilde{J}_o(\pi - \alpha)$ où $\tilde{J}_o(\alpha)$ est donné par (3.35).

Deuxième partie

Extension de la théorie de Bogoliubov aux quasicondensats

Introduction

La condensation de Bose-Einstein est un phénomène de statistique quantique dû à l'indiscernabilité des bosons. Elle apparaît à basse température pour des systèmes 3D lorsque la longueur d'onde thermique de de Broglie devient de l'ordre de la distance entre particules c'est-à-dire lorsqu'on atteint la dégénérescence quantique. Lorsqu'on diminue la température au-delà de cette limite, on peuple macroscopiquement un unique mode alors même que l'énergie thermique $k_B T$ est supérieure à l'énergie du premier état excité.

La première observation d'une telle condensation dans des gaz ultrafroids d'atomes alcalins piégés magnétiquement a été réalisée en 1995 dans les groupes du JILA [40] et du MIT [41]. Cet effet spectaculaire est sûrement à l'origine de l'essor très récent du domaine des atomes froids, aujourd'hui à la frontière entre la physique atomique, la physique de la matière condensée, l'optique quantique et la physique nucléaire. La condensation de Bose-Einstein est d'ailleurs évoquée depuis de nombreuses années pour décrire différents phénomènes physiques, comme l'état superfluide de l'hélium 4, les condensats formés par des paires excitons-trous, etc [86]. Néanmoins, ces expériences dans les gaz d'atomes ultrafroids constituent le premier exemple de condensation de Bose-Einstein dans un milieu dilué en interaction faible. Les densités atomiques sont de l'ordre de 10^{13} atomes/cm^3 ce qui est beaucoup plus faible que la densité de l'air qui nous entoure. Il faut donc descendre à de très basses températures pour observer une condensation de Bose-Einstein (de l'ordre du μK). En contrepartie, le système est un gaz très peu dense, c'est-à-dire que la portée des interactions r_e reste petite devant la distance moyenne entre atomes, ce qui s'écrit en terme de la densité n : $nr_e^3 \ll 1$. Ceci permet une description théorique microscopique où la comparaison entre la théorie et l'expérience est plus transparente que dans le cas des théories semi-phénoménologiques décrivant les liquides de Bose. En fait et pour de nombreuses expériences, le comportement de ces gaz dilués est très proche de celui d'un gaz de Bose parfait.

Le fait que l'on considère des systèmes 3D est essentiel pour la condensation de Bose-Einstein. Si on prend l'exemple du gaz parfait homogène, il y a condensation de Bose-Einstein à 3D mais pas à 2D, ni à 1D (à température non nulle). Cette différence est directement liée à la forme de la densité d'états $\rho(\epsilon)$ qui est proportionnelle à $\sqrt{\epsilon}$ à 3D, indépendante de ϵ à 2D et de la forme $\rho(\epsilon) \sim 1/\sqrt{\epsilon}$ à 1D. Par ailleurs, la présence d'un piège harmonique, comme c'est le cas dans la plupart des expériences d'atomes froids, change la forme de la densité d'état et peut donc modifier les conclusions concernant l'effet de la dimensionalité. Pour un gaz parfait, on peut observer un condensat à 2D [87] et les systèmes 1D présentent

aussi des caractéristiques correspondant à l'occupation macroscopique d'un seul mode [88].

La description physique des gaz de Bose dégénérés de basse dimension est encore compliquée par la présence des interactions. De nombreux travaux ont déjà étudié les effets des interactions en dimension réduite, principalement pour des gaz (ou des liquides) homogènes. A 2D, il n'y a pas de transition de Bose-Einstein mais une transition vers un état superfluide à suffisamment basse température. Kosterlitz et Thouless ont montré que cette transition est associée à l'apparition, en dessous de la température critique $T_{KT} = (\pi\hbar^2/2m)n_s$ (n_s est la densité superfluide en dessous de la transition), de paires liées vortex-antivortex. Si n_s est de l'ordre de la densité totale du système, alors la température de Kosterlitz-Thouless T_{KT} est de l'ordre de la température délimitant le régime de dégénérescence quantique. En dessous de cette transition, il n'y a pas d'ordre à longue portée, c'est-à-dire que la matrice densité à un corps $\langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})\rangle$ tend vers zéro lorsque $|\mathbf{r}'-\mathbf{r}| \to +\infty$ selon une décroissance en loi de puissance [89]. Cela signifie entre autres, selon le critère de Penrose-Onsager, qu'il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein. Les fluctuations de la phase du champ atomique $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ donnent une longueur de cohérence finie à celle-ci et détruisent ainsi l'ordre à longue portée. La situation est toutefois différente à température nulle car la matrice densité à un corps tend vers une constante à grande distance et il y a condensation de Bose-Einstein.

A 1D, la situation est différente parce qu'il n'y a pas de transition de phase entre les hautes et les basses températures [90]. Le comportement à grande distance de la matrice densité à un corps est une décroissance exponentielle à $T \neq 0$ et une décroissance en loi de puissance à $T = 0$, les fluctuations de phase détruisant ici aussi l'ordre à longue portée. Il n'y a donc jamais de condensation de Bose-Einstein à 1D. Cependant, loin dans le régime de dégénérescence critique, la longueur de cohérence de la phase du champ atomique peut prendre des valeurs importantes ce qui explique qu'une même approche théorique puisse décrire aussi bien les gaz de Bose 1D que 2D.

A température non nulle, il n'y a donc pas de condensation de Bose-Einstein [89] à 1D et 2D dans la limite thermodynamique, ce qui est une conséquence du théorème général de Mermin-Wagner-Hohenberg [91, 92].

Toutes ces considérations théoriques sont aujourd'hui d'actualité d'un point de vue expérimental en particulier dans le domaine des atomes froids. Des progrès récents ont été obtenu dans la formation de gaz piégés d'atomes froids quasi-1D ou quasi-2D qui doivent permettre la comparaison avec les théories existantes [93, 46]. Ces gaz de dimension réduite sont obtenus en confinant fortement le gaz dans une ou deux directions. Lorsque les énergies caractéristiques du nuage atomique, l'énergie thermique k_BT et le potentiel chimique μ, sont plus petites que l'énergie d'excitation du piège dans la ou les directions confinées, le gaz devient quasi-1D ou quasi-2D d'un point de vue cinématique [94, 95]. En particulier, les fonctions d'onde des atomes sont restreintes au mode fondamental de la direction de confinement. Dans d'autres expériences, on piège les atomes dans un réseau optique 2D qui forme une matrice de tubes allongés contenant chacun un gaz quasi-1D [96].

Les effets de dimension réduite dans les gaz de Bose ajoutés aux interactions et à la forme du piège conduisent à une physique très riche et les outils théoriques la décrivant ne sont pas aussi clairs que leurs équivalents dans l'étude des condensats de Bose-Einstein habituels. Ainsi, par exemple, le caractère discret des niveaux d'énergie du piège supprime les fluctuations de phase à très grande longueur d'onde mais, d'un autre côté, une géométrie allongée favorise le développement de fluctuations de phase dans la direction allongée. L'observation de fluctuations de phase importantes pour lesquelles la longueur de cohérence du champ est plus petite que la taille du système ne nécessite pas forcément une dimensionalité réduite mais plutôt un grand rapport d'aspect dans la forme du nuage atomique piégé. Expérimentalement, ces fluctuations de phase ont été observées dans des gaz de Bose 3D dégénérés en forme de cigare très allongé, soit en mesurant les fluctuations de densité résultant des fluctuations de phase après expansion lors du temps de vol [97], soit en mesurant la distribution en impulsions du gaz qui est directement reliée à la matrice densité à un corps [98].

Avant de présenter le cadre et l'approche développée dans cette thèse, nous allons revenir sur les nombreuses approches théoriques qui concernent les condensats de dimensionalité réduite. Dans le cas typique d'un condensat de Bose-Einstein 3D dans le régime d'interaction faible, la théorie de Bogoliubov [99] donne une description exacte du système dans la limite des très faibles températures. Le principe de la théorie de Bogoliubov est d'effectuer un développement perturbatif en fonction d'un petit paramètre. Pour cela, on utilise le fait que le mode du condensat est macroscopiquement peuplé. Dans la version plus récente de la théorie de Bogoliubov qui ne brise pas la symétrie $U(1)$ [100, 101], on écrit le champ atomique sous la forme $\hat{\psi} = \phi_0 \hat{a}_0 + \delta\hat{\psi}$, où $\hat{a}_0$ détruit une particule dans le mode du condensat. $\delta\hat{\psi}$ décrit lui les fluctuations thermiques et quantiques peuplant les autres modes. Le petit paramètre du développement s'appuie donc sur la supposition $|\delta\hat{\psi}| \ll |\hat{a}_0|$ qu'on peut vérifier *a posteriori*. Malheureusement, l'approche de Bogoliubov ne peut pas s'appliquer aux systèmes de dimensionalité réduite car il n'y a pas de condensat, donc pas de mode macroscopiquement peuplé.

L'approche la plus aboutie sur les gaz de Bose de basse dimension est l'approche d'intégrale fonctionnelle de Popov [102]. C'est aussi la plus hermétique. Le principe de cette approche est de séparer le champ atomique $\hat{\psi} = \hat{\psi}_0 + \hat{\psi}_1$ entre une partie rapide $\hat{\psi}_1$ incluant tous les modes d'impulsion supérieure à k_0 et une partie lente $\hat{\psi}_0$ incluant les modes d'impulsion inférieure à k_0. Le champ $\hat{\psi}_0$ joue alors le rôle d'un *condensat nu* légèrement oscillant et $\hat{\psi}_1$ décrit les excitations au-delà de ce condensat. L'intégration sur le champ $\hat{\psi}_1$, c'est-à-dire sur les modes de haute énergie, conduit à une théorie effective de type hydrodynamique pour le champ $\hat{\psi}_0$ qu'il est plus commode de décrire en coordonnées polaires, c'est-à-dire en termes de phase et de densité du champ $\hat{\psi}_0$. Cette théorie effective est bien sûr valable uniquement à basse énergie (pour $|\mathbf{k}| < k_0$). L'énergie de coupure entre les hautes et les basses énergies peut être choisie de l'ordre du potentiel chimique ($k_0 \simeq 1/\xi$) si bien qu'on trouve pour les modes collectifs le spectre linéaire des ondes sonores.

En cherchant à appliquer la méthode de Popov au gaz de Bose homogène 2D, Kagan, Svistunov et Shlyapnikov ont introduit le concept de *quasicondensat* [103],

ou de condensat dont la phase fluctue. En effet, pour un gaz 1D ou 2D, les fluctuations de densité peuvent être réduites par des interactions répulsives [104, 105] par rapport au gaz parfait. On obtient alors un gaz dont la densité est bien définie et les fluctuations de phase donnent une longueur de cohérence ℓ_ϕ finie au champ atomique $\hat{\psi}$. Le système est alors presque un condensat car sur des distances plus petites que ℓ_ϕ, il a les mêmes propriétés qu'un condensat. Cependant pour des distances supérieures à ℓ_ϕ, l'ordre à longue portée est détruit par les fluctuations de phase. Ce concept, ainsi que l'approche de Popov, ont été depuis appliqués aux gaz piégés 1D et 2D [106, 95, 107], permettant une explication théorique des expériences de Hanovre [108]. Tels qu'ils ont été développés, les travaux inspirés par l'approche de Popov souffrent d'un défaut d'ordre technique. Si on se restreint aux modes de basse énergie, c'est-à-dire aux modes dont l'énergie est plus petite que le potentiel chimique, on est obligé d'introduire une coupure en énergie dans la théorie. Les prédictions d'observables dépendent de cette coupure et peuvent diverger dans la limite où on fait tendre cette coupure vers l'infini [109]. Pour éliminer cette dépendance en k_0, il faut inclure dans l'approche les modes d'énergie supérieure au potentiel chimique [110, 111]. Nous allons montrer dans cette thèse que la séparation des énergies au voisinage du potentiel chimique n'est pas nécessaire et que l'on peut traiter toutes les énergies par la même approche. Nous introduirons aussi une coupure en énergie mais celle-ci est beaucoup plus grande que le potentiel chimique et elle disparaît des prédictions d'observables.

Dans une autre approche basée sur l'opérateur courant-densité, Schwartz développe l'hamiltonien pour des faibles fluctuations de densité et des faibles fluctuations de courant. Les résultats obtenus relient la fonction de corrélation du champ au facteur de structure statique [112]. Néanmoins, le remplacement brutal de ce facteur de structure par son expression dans l'approche de Bogoliubov conduit aussi à des termes divergents à grand vecteur d'onde. L'approche d'intégrale fonctionnelle a été récemment reconsidérée. Elle donne un formalisme sans divergence [113, 114] qui reproduit les résultats de Bogoliubov à 3D [115].

Sur le traitement théorique des systèmes 1D, un grand classique reste le travail de Lieb et Liniger. Ces deux auteurs ont résolu exactement le cas 1D homogène pour des bosons interagissant selon une force de contact répulsive [116, 117]. Ils utilisent pour cela l'ansatz de Bethe [118] pour diagonaliser l'hamiltonien. Cette méthode exacte et valable quelque soit la force de l'interaction est toutefois limitée par la difficulté des calculs analytiques qui en découlent. Plus récemment, son application aux gaz de Bose piégés quasi-1D a donné lieu à de nombreux travaux explorant le passage du régime d'interaction faible au régime d'interaction forte, ou régime de Tonks-Girardeau [119, 120, 121, 122].

Venons en maintenant au projet de cette thèse où nous proposons une approche de Bogoliubov améliorée de type phase-densité pour traiter les quasicondensats de gaz de Bose faiblement interagissant dans le régime de dégénérescence quantique. Dans notre approche, on écrit l'opérateur champ $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ sous la forme $\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \exp(i\hat{\theta}(\mathbf{r}))\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}$ où $\hat{\theta}(\mathbf{r})$ et $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ sont des opérateurs décrivant la phase du champ et la densité. Cette décomposition du champ atomique est déjà présente dans la littérature mais sans définition précise de l'opérateur phase [123]. Ce point est particulièrement délicat et peut conduire à des divergences dans une approche

trop simplifiée [109]. Il est par ailleurs bien connu en optique quantique [124]. Le concept de phase d'un condensat est habituellement introduit dans le cadre de l'équation de Gross-Pitaevskii qui correspond à une description classique et non quantique du condensat. On peut en fait montrer que, dans l'écriture précédente de $\hat{\psi}$, l'opérateur $\exp(i\hat{\theta})$ n'est pas unitaire ce qui montre que $\hat{\theta}$ n'est pas hermitien. Le caractère non unitaire de $\exp(i\hat{\theta})$ vient en fait de la possibilité qu'a la densité de s'annuler. Pour contourner ce problème, nous discrétisons l'espace physique en un réseau de petites boîtes : on peut alors négliger ce problème de non unitarité dans la limite où toutes les boîtes sont fortement peuplées. D'une certaine façon, on se ramène à une description semi-classique car la construction de chaque phase fait intervenir un grand nombre de particules. Notre méthode pour définir la phase n'est pas sans lien avec la séparation des variables lentes et rapides de l'approche de Popov. Le passage aux coordonnées polaires de phase et de densité ne se fait que pour la variable lente $\hat{\psi}_0$, c'est-à-dire pour les grandes longueurs d'onde.

Dans ce modèle sur réseau, nous développons de façon systématique l'hamiltonien en fonction de deux petits paramètres qui sont les fluctuations relatives de densité dans chaque boîte et la différence de phase entre boîtes voisines. La résolution perturbative des équations conduit à des expressions simples pour les fonctions de corrélations du champ, qui ne dépendent pas de la coupure en énergie provenant de la discrétisation, et qui reproduisent les résultats de la théorie de Bogoliubov à 3D. On peut aussi dans notre approche calculer l'énergie de l'état fondamental ainsi que l'équation d'état du gaz, les expressions obtenues ne dépendant pas non plus de la coupure en énergie.

Dans une première partie, nous explicitons la notion de discrétisation de l'espace et de modèle sur réseau. Nous montrons la nécessité d'une telle discrétisation pour une définition précise de l'opérateur donnant la phase. Nous détaillons la forme de l'hamiltonien modèle en précisant le lien entre les propriétés de collision des potentiels réels et la constante de couplage du potentiel de contact modèle que l'on a choisi. Pour finir, nous insistons sur l'ensemble des restrictions au domaine de validité de notre approche.

Dans une seconde partie, nous expliquons la méthode de développement et de résolution de l'hamiltonien. Nous appliquons le formalisme pour calculer l'équation d'état, l'énergie du fondamental ainsi que les fonctions de corrélation du premier et du second ordre. Ces résultats se confondent avec la théorie de Bogoliubov lorsqu'un condensat est présent. Des expressions explicites sont données pour le cas d'un gaz homogène à 1D, 2D et 3D. On montre qu'on retrouve notamment de nombreuses prédictions déjà présentes dans la littérature.

Chapitre 1

Modèle sur réseau

La représentation densité-phase est présente dans différents travaux sur les condensats, comme par exemple l'étude des modes propres du condensat [125] ou l'étude des vortex dans les superfluides. Les équations hydrodynamiques décrivant le superfluide sont obtenues à partir de l'équation de Gross-Pitaevskii et les champs classiques donnant la phase et la densité sont construits à partir de la fonction d'onde du condensat. Le gaz de Bose est ainsi traité dans une approche de champ classique qui ne fait pas intervenir d'opérateurs : l'aspect quantique semble avoir disparu. Il est en fait présent dans la formulation même du problème en terme d'un unique champ classique, la fonction d'onde du condensat, qui décrit macroscopiquement l'ensemble des atomes du gaz de Bose.

Dans notre approche, on souhaite au contraire que la phase et la densité soient représentées par des opérateurs quantiques. L'absence de condensat ne permet pas de traiter le gaz à l'aide d'un unique champ classique. La définition de l'opérateur donnant la phase nécessite une discrétisation de l'espace physique comme nous allons le montrer dans ce chapitre. L'espace est séparé en petites boîtes fortement peuplées en atomes et on définit une phase pour chacune des boîtes. Les phases sont par conséquent des objets mésoscopiques définis à partir d'un grand nombre d'atomes, c'est-à-dire dans une limite où le champ est quasiclassique.

Dans ce chapitre, nous détaillons les notions de modèle sur réseau et de discrétisation de l'espace. Une telle discrétisation est nécessaire si l'on veut utiliser les fluctuations de densité comme petit paramètre de notre approche mais aussi afin de construire précisément l'opérateur donnant la phase ou pour remplacer le vrai potentiel par un potentiel modèle simplifié ayant les mêmes propriétés de collision à basse énergie. On conclut en précisant l'ensemble des conditions d'application de notre approche.

1.1 Principe d'un modèle sur réseau

1.1.1 Discrétisation de l'espace

Dans un modèle continu, les différents champs et observables physiques décrivant le système dépendent d'une position $\mathbf{r}$ qui est une variable continue, contrairement à un modèle sur réseau où $\mathbf{r}$ est une variable discrète qui décrit les noeuds

d'un réseau. Le réseau le plus simple -et celui que nous allons considérer- est un réseau carré de pas ℓ. La mise sur réseau carré d'un problème continu est une discrétisation de l'espace qui consiste à séparer celui-ci en petites boîtes carrées de volume ℓ^d (d est la dimension d'espace). Les centres de ces boîtes forment le réseau carré et les particules dans chaque boîte sont décrites collectivement par la valeur du champ atomique $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ et des observables physiques en leur centre. Le principe de la discrétisation est représenté figure 1.1.

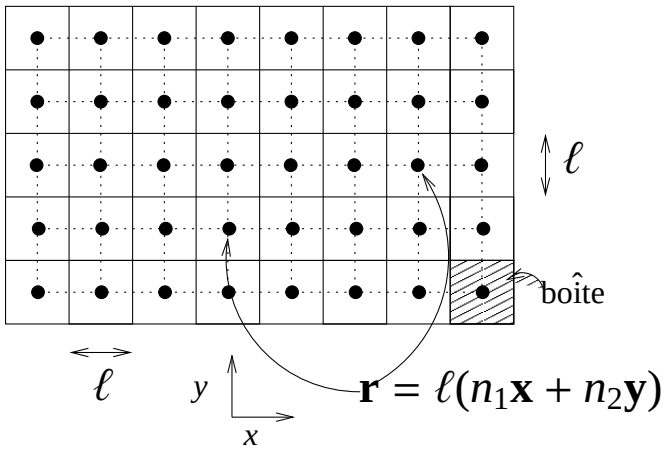


FIG. 1.1: Schéma de la discrétisation de l'espace en boîtes de taille ℓ^d dans le cas bidimensionnel. Les centres des boîtes, correspondant aux noeuds du réseau en pointillées, sont repérés par les indices entiers n_1 et n_2.

Le modèle sur réseau est bien entendu une approximation de l'espace réel continu. On s'attend cependant à ce qu'un modèle sur réseau décrive bien tous les phénomènes faisant intervenir des longueurs d'onde grandes par rapport à la taille du réseau ℓ. En quelque sorte, les solutions du problème sur réseau tendent asymptotiquement vers les solutions exactes du problème continu lorsque les longueurs d'onde tendent vers l'infini ou, de façon équivalente, lorsque la taille du réseau tend vers zéro. Cette caractéristique est à la base de tout calcul numérique cherchant à intégrer une équation différentielle ou tout simplement une fonction.

Donnons un exemple très classique : celui de bosons à 1D interagissant selon un potentiel de contact. La version continue de ce problème donne l'hamiltonien de Lieb et Liniger qu'on peut diagonaliser par l'ansatz de Bethe. Dans la version discrète, l'hamiltonien est celui de Bose-Hubbard. Dans la limite des fortes interactions où les petites longueurs d'onde jouent un grand rôle, les deux théories se sont pas équivalentes même si les comportements peuvent être analogues pour certaines propriétés. La version continue évolue vers le régime de Tonks-Girardeau où on observe une fermionisation des bosons tandis que la version discrète évolue vers la phase dite de Mott où les fluctuations du nombre de particule à chaque pas du réseau sont presque nulles. Au contraire, dans la limite des faibles interactions où les grandes longueurs d'onde sont dominantes, les descriptions discrète et continue sont totalement équivalentes pour la phase dite superfluide.

Revenons sur le concept de discrétisation et sur ces implications. On peut

voir celle-ci comme une moyenne sur les petites longueurs (plus petites que ℓ) qui revient à supprimer les modes de petites longueurs d'onde. On applique ainsi une coupure en vecteur d'onde de l'ordre de π/ℓ correspondant à l'énergie $\hbar^2/m\ell^2$. Le modèle discret est par conséquent une théorie effective à basse énergie du vrai problème continu. Dans notre cas, les échelles d'énergie caractéristiques sont le potentiel chimique μ et l'énergie thermique k_BT. La coupure doit être au moins supérieure à ces énergies ce qui implique une limite supérieure sur la longueur ℓ :

$$\ell < \xi \qquad \text{et} \qquad \ell < \lambda, \tag{1.1}$$

où

$$\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{m\mu}} \tag{1.2}$$

est la longueur de relaxation et

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

la longueur d'onde de de Broglie.

1.1.2 Discrétisation des opérateurs

L'hamiltonien prend sur le réseau la forme suivante :

$$\begin{aligned} H = \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\Delta\hat{\psi}(\mathbf{r}) + (U(\mathbf{r})-\mu)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \\ + \frac{g_0}{2}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\Big], \end{aligned} \tag{1.4}$$

où $U(\mathbf{r})$ est un potentiel extérieur et où le Laplacien est un opérateur symétrique qui couple les boîtes voisines :

$$\Delta f(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{f(\mathbf{r}+\ell\mathbf{e_j}) + f(\mathbf{r}-\ell\mathbf{e_j}) - 2f(\mathbf{r})}{\ell^2}. \tag{1.5}$$

Les $\mathbf{e_j}$ sont les vecteurs unitaires désignant les différentes directions orthogonales du réseau. Pour le potentiel d'interaction entre particules, on a pris un potentiel de contact :

$$V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{g_0}{\ell^d}\delta_{\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2}, \tag{1.6}$$

nous reviendrons dans la section 1.3 sur ce choix ainsi que sur la détermination de g_0 en fonction des caractéristiques du vrai potentiel d'interaction entre deux atomes.

Les relations de commutations sont aussi modifiées. Pour des champs continus, on a :

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{1.7}$$

On moyenne cette relation, pour chacune des positions $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$, sur le volume d'une boîte. Si ce sont deux boîtes différentes, alors $[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0$, s'il s'agit de la

même boîte, alors $[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 1/\ell^d$, ℓ^d étant le volume d'une boîte. D'une façon générale, la relation de commutation moyennée donne :

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{\ell^d}. \tag{1.8}$$

Nous partirons de cette relation de commutation pour construire l'espace des états du modèle sur réseau.

1.2 Nécessité d'une approche sur réseau

On a vu que pour des tailles de boîte suffisamment petites, le modèle sur réseau reproduit bien les caractéristiques d'un système réel continu. Dans cette section, nous donnons deux raisons pour lesquelles une discrétisation de l'espace est nécessaire à notre approche : l'introduction d'un petit paramètre décrivant les fluctuations de densité et la définition précise d'un opérateur donnant la phase.

1.2.1 Fluctuations de densité

Un des petits paramètres de notre développement est l'opérateur donnant les fluctuations de densité. Cependant, dans un modèle continu, ces fluctuations de densité sont infinies. Ainsi, si on calcule la variance de la densité définie par :

$$\mathrm{Var}(\hat{\rho}(\mathbf{r})) \equiv \langle \hat{\rho}(\mathbf{r})^2 \rangle - \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle^2, \tag{1.9}$$

celle-ci fait intervenir la valeur moyenne de $\hat{\rho}(\mathbf{r})^2$ pour laquelle le produit des champs atomiques n'est pas dans l'ordre normal. Par conséquent, cette variance est infinie. En effet, on peut récrire $\hat{\rho}(\mathbf{r})^2$ sous la forme :

$$\langle \hat{\rho}(\mathbf{r})^2 \rangle = \delta(\mathbf{0})\rho(\mathbf{r}) + \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle \tag{1.10}$$

où l'on a utilisé la relation de commutation (1.7) de façon à mettre le produit de champs atomiques dans l'ordre normal. $\rho(\mathbf{r}) = \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle$ est la densité moyenne. $\delta(\mathbf{0})$ est la valeur de la distribution de Dirac à l'origine et est donc infinie tandis que le second terme de l'équation (1.10) est la densité de probabilité de trouver deux bosons au même point de l'espace et est par conséquent fini.

Il est donc impossible d'utiliser les fluctuations de densité comme petit paramètre dans le cas d'un espace continu. La divergence des fluctuations de densité provient de la contribution des petites longueurs d'onde. Si on supprime ces petites échelles en moyennant la densité sur une boîte $\mathcal{B}$ de volume ℓ^d avec $\hat{n} = \int_{\mathcal{B}} d\mathbf{r}\hat{\rho}(\mathbf{r})$, alors les fluctuations de cette densité intégrée, qui donne le nombre de particules dans la boîte $\mathcal{B}$, sont maintenant finies :

$$\frac{\mathrm{Var}\,\hat{n}}{\langle \hat{n} \rangle^2} = \frac{1}{\langle \hat{n} \rangle} + \frac{\int_{\mathcal{B}} \int_{\mathcal{B}} \left[\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle - \hat{\rho}(\mathbf{r})\hat{\rho}(\mathbf{r}') \right]}{\langle \hat{n} \rangle^2}. \tag{1.11}$$

Ceci est similaire à ce qui se produirait dans une expérience réelle mesurant la densité : on ne trouve donc pas de fluctuations divergentes de la densité dans une

mesure expérimentale car on mesure toujours une densité intégrée sur un petit volume. Le premier terme de l'expression (1.11) est responsable de la divergence des fluctuations de densité lorsque la taille de la boîte $\mathcal{B}$ tend vers zéro. Il devient petit si l'on considère des boîtes suffisamment peuplées, c'est-à-dire pour $\langle\hat{n}\rangle \gg 1$. Dans ce cas, les fluctuations de la densité intégrée coïncident avec le second terme de l'expression (1.11) qui correspond à ce qu'on entend habituellement par les *fluctuations relatives de densité*. On verra dans la section 1.4 les conditions pour qu'elles soient petites.

De façon à éviter cette divergence, il est plus commode de remplacer dès le début l'espace continu par un modèle sur réseau. Dans ce cas, le calcul de la variance de la densité discrète donne un résultat fini semblable à l'expression (1.11) et les fluctuations de densité peuvent jouer le rôle de petit paramètre dans notre approche. Les conditions pour que ces fluctuations de densité soient petites s'écrivent alors :

$$|\langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\rangle - \rho^2(\mathbf{r})| \ll \rho^2(\mathbf{r}), \tag{1.12}$$

$$\rho(\mathbf{r})\ell^d \gg 1, \tag{1.13}$$

la deuxième inégalité impliquant que le nombre de particules dans chaque boîte est important.

1.2.2 Définition d'un opérateur donnant la phase

Une définition précise d'un opérateur phase hermitien dans une approche quantique est toujours délicate. Dans un espace continu, on suppose par exemple qu'entre les opérateurs donnant la phase $\hat{\theta}(\mathbf{r})$ et la densité $\hat{\rho}(\mathbf{r})$, on choisisse la relation de commutation suivante :

$$[\hat{\rho}(\mathbf{r}), \hat{\theta}(\mathbf{r}')] = i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{1.14}$$

On intègre dans cette relation la densité sur une boîte $\mathcal{B}$ et on obtient :

$$[\hat{n}, \hat{\theta}(\mathbf{r}')] = i\delta(\mathbf{r}', \mathcal{B}) \tag{1.15}$$

où $\hat{n} = \int_{\mathcal{B}} d\mathbf{r}\hat{\rho}(\mathbf{r})$ est la densité intégrée et δ une fonction delta discrète qui vaut 1 si $\mathbf{r}'$ est dans la boîte $\mathcal{B}$ et 0 sinon.

On note simplement $\hat{\theta}$ la phase $\hat{\theta}(\mathbf{r}')$ pour $\mathbf{r}' \in \mathcal{B}$, la relation de commutation (1.15) indique que $\hat{\theta}(\mathbf{r}')$ et $\hat{n}$ sont conjugués à partir de quoi on montre l'inégalité suivante :

$$\mathrm{Var}\,\hat{n} \cdot \mathrm{Var}\,\hat{\theta} \geq \frac{1}{4}. \tag{1.16}$$

On trouve ici une incohérence car cette inégalité est forcément incorrecte. En effet, lorsque la taille de la boîte tend vers zéro, sa variance tend aussi vers zéro alors que la variance de la phase reste finie, celle-ci ne pouvant prendre des valeurs qu'entre 0 et 2π.

On peut aussi s'appuyer sur l'argument de Louisell consistant à prendre l'équation (1.15) entre les états $|m : \phi\rangle$ et $|m' : \phi\rangle$. $|m : \phi\rangle$ désigne l'état de Fock où

m particules sont toutes dans l'état décrit par la fonction d'onde $\phi(\mathbf{r})$ à support contenu dans la boîte $\mathcal{B}$. On obtient ainsi :

$$\langle m : \phi|\hat{\theta}|m' : \phi\rangle(m - m') = i\delta_{m,m'}, \tag{1.17}$$

qui aboutit à une contradiction lorsque $m = m'$.

La définition d'un opérateur donnant la phase et vérifiant (1.14) n'est donc pas réalisable. La phase est canoniquement conjuguée à un nombre de particules et non à une densité. Si ce nombre de particules devient très petit, sa probabilité de s'annuler devient importante et la phase n'est alors plus définie. Dans un modèle sur réseau, les particules sont regroupées dans des boîtes. Nous allons voir qu'un grand nombre de particules dans une boîte permet de construire un opérateur phase.

Détaillons la construction de l'opérateur phase dans le modèle sur réseau. Pour chaque boîte, on introduit la base des états de Fock $|n, \mathbf{r}\rangle$ avec exactement n particules dans la boîte de centre $\mathbf{r}$. Étant donné la relation de commutation (1.8), on montre que les éléments de matrice de l'opérateur champ sont de la forme :

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}')|n, \mathbf{r}\rangle &= \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{\ell^{d/2}}\sqrt{n}\,|n-1, \mathbf{r}\rangle, \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')|n, \mathbf{r}\rangle &= \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{\ell^{d/2}}\sqrt{n+1}\,|n+1, \mathbf{r}\rangle. \end{aligned} \tag{1.18}$$

A partir de l'opérateur champ, on définit l'opérateur donnant la densité atomique $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})$ qui est diagonal dans la base des états de Fock :

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}')|n, \mathbf{r}\rangle = \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\,\frac{n}{\ell^d}\,|n, \mathbf{r}\rangle. \tag{1.19}$$

On introduit maintenant l'opérateur $\hat{A}$ défini par :

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) \equiv \hat{A}(\mathbf{r})\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}. \tag{1.20}$$

Cet opérateur a pour effet de réduire de 1 le nombre d'atomes dans la boîte $\mathbf{r}$:

$$\hat{A}(\mathbf{r}')|n, \mathbf{r}\rangle = (1 - \delta_{n,0})\,\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}|n-1, \mathbf{r}\rangle, \tag{1.21}$$

son action sur le vide donnant zéro. A partir de cette expression et pour chaque boîte de centre $\mathbf{r}$ on montre les relations suivantes :

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = I, \qquad \hat{A}^\dagger\hat{A} = I - |0\rangle\langle 0| \qquad \text{et} \qquad [\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = |0\rangle\langle 0|, \tag{1.22}$$

I étant l'opérateur identité et $|0\rangle$ l'état à zéro particule dans la boîte de centre $\mathbf{r}$. De ces expressions, on conclut que l'opérateur $\hat{A}$ est presque unitaire, c'est-à-dire qu'il n'est formellement pas unitaire mais que pour des états dont la probabilité d'avoir une boîte vide est très faible, on peut le considérer comme unitaire.

Dans ce cas, on écrit l'opérateur unitaire $\hat{A}$ sous la forme :

$$\hat{A}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\hat{\theta}(\mathbf{r})} \qquad \text{avec} \qquad \hat{\theta}^\dagger(\mathbf{r}) \simeq \hat{\theta}(\mathbf{r}) \tag{1.23}$$

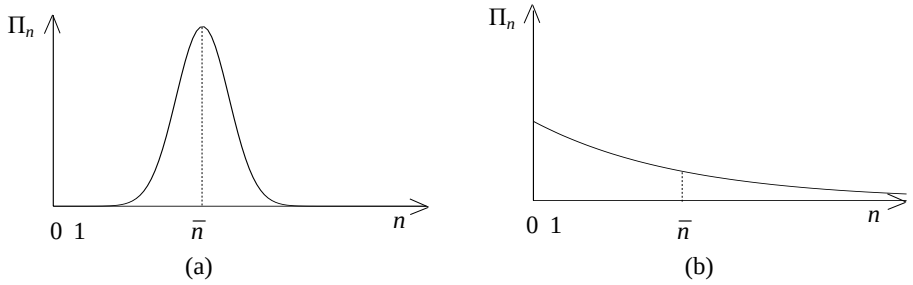


FIG. 1.2: Distribution de probabilité du nombre d'atomes dans une boîte. (a) Distribution gaussienne où les états à petit nombre d'atomes sont négligeables : convient pour définir un opérateur phase. (b) Distribution exponentielle où les états à petit nombre d'atomes ne sont pas négligeables : ne convient pas pour définir un opérateur phase.

ce qui revient à écrire l'opérateur champ selon :

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\hat{\theta}(\mathbf{r})}\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}. \tag{1.24}$$

Cette dernière expression indique que l'opérateur phase $\hat{\theta}(\mathbf{r})$ n'est plus défini lorsque la densité s'annule ce qui nous ramène à la restriction aux boîtes non vides.

Si on veut être plus précis, il faut aussi pouvoir négliger dans l'approche les états de Fock où le nombre d'atomes est petit. Les observables et l'hamiltonien contiennent en effet des termes en $\exp(im\hat{\theta}(\mathbf{r}))$ (m est un entier) qui couplent les états de Fock $|n+m,\mathbf{r}\rangle$ et $|n,\mathbf{r}\rangle$. La figure 1.2 montre deux distributions de probabilité pour le nombre d'atomes dans une boîte. La distribution gaussienne convient pour l'approche mais pas la distribution exponentielle pour laquelle les états à petit nombre d'atomes ne sont pas négligeables.

Une condition suffisante pour définir l'opérateur phase est donc d'avoir une distribution du nombre d'atomes dans chaque boîte qui soit piquée autour d'une valeur moyenne beaucoup plus grande que 1. On retrouve notamment les restrictions (1.12) et (1.13) vues dans le paragraphe précédent.

Dans notre approche phase-densité, on utilisera les relations de commutation suivantes :

$$[\hat{\rho}(\mathbf{r}),\hat{\theta}(\mathbf{r}')] \simeq \frac{i\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{\ell^d}, \qquad [\hat{\rho}(\mathbf{r}),\hat{\rho}(\mathbf{r}')] = 0, \qquad [\hat{\theta}(\mathbf{r}),\hat{\theta}(\mathbf{r}')] \simeq 0, \tag{1.25}$$

qui permettent de retrouver les relations de commutation sur le champ bosonique $\hat{\psi}(\mathbf{r})$, voir par exemple (1.8).

1.3 Diffusion sur une grille

1.3.1 Pseudopotentiels

Comme nous allons le voir dans la section 1.4, notre approche est restreinte aux gaz en faible interaction. A 2D et à 3D, ce régime correspond à une faible densité. Ainsi le gaz est dilué et les atomes sont le plus souvent loin les uns des

autres. Pour cette raison et si on se restreint au premier ordre dans l'interaction, seules les caractéristiques à grande distance des collisions binaires entre atomes interviennent dans le calcul des observables. Le seul paramètre pertinent est alors la longueur de diffusion a et les détails du potentiel à courte distance n'ont pas d'importance.

C'est dans ce cadre qu'on introduit habituellement la méthode des pseudopotentiels. L'utilisation du vrai potentiel dans une théorie perturbative est problématique, notamment parce qu'il n'est pas justifié de le traiter dans l'approximation de Born. L'idée est donc de remplacer le vrai potentiel par un potentiel modèle dont les propriétés de diffusion à basse énergie coïncident avec celles du vrai potentiel. Ce potentiel modèle peut alors être traité dans l'approximation de Born et convient parfaitement à une théorie perturbative.

A 3D, on peut utiliser le pseudo-potentiel de Fermi [52] :

$$V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{4\pi a\hbar^2}{m}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\frac{\partial}{\partial_{r_{12}}}(r_{12}\,\cdot) \tag{1.26}$$

qui donne l'amplitude de diffusion $f = -a/(1+ika)$. Cette amplitude de diffusion est la même, dans la limite où $k \to 0$, que celle de tout potentiel dont la longueur de diffusion est a. Ce potentiel modèle est par ailleurs un potentiel de contact du fait de la présence de la fonction de Dirac. L'opérateur $(\partial/\partial_{r_{12}})(r_{12}\,\cdot)$ régularise les fonctions qui divergent en $1/r_{12}$ en $r_{12} = 0$ et laissent invariantes les autres fonctions. Récemment, Olshanii et Pricoupenko ont proposé un ensemble général de pseudopotentiels à 1D, 2D et 3D [126].

La discrétisation de l'espace est un autre moyen de traiter les singularités ultraviolettes. Le principe est assez semblable à celui de la méthode des pseudopotentiels. On remplace le vrai potentiel par un potentiel modèle, ici un simple potentiel de contact (1.6), dont on choisit les caractéristiques de façon à reproduire les propriétés de diffusion à basse énergie du vrai potentiel.

On peut se passer de l'opérateur de régularisation qui apparaît dans l'expression du pseudo-potentiel car les boîtes ont une taille finie. En contrepartie, nous verrons que la constante de couplage g_0 peut dépendre de la taille des boîtes ℓ.

1.3.2 Détermination de g_0

On cherche maintenant à relier g_0 aux propriétés de collisions du vrai potentiel à basse énergie. La méthode que nous allons suivre consiste à calculer la matrice T_{grid} dans notre modèle sur réseau puis de l'identifier à la limite basse énergie de la matrice T calculée à partir du potentiel exact.

Le calcul formel de la matrice T_{grid} sur réseau se ramène au calcul de l'intégrale (voir **encadré** 1) :

$$\mathcal{I}(E) = \langle \mathbf{r} = 0|G_0(E + i\eta)|\mathbf{r} = 0\rangle = \int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{1}{E + i\eta - \hbar^2k^2/m}, \tag{1.27}$$

où $\mathcal{D} = [-\pi/\ell, \pi/\ell]^d$ est le domaine d'intégration des vecteurs d'onde pour notre modèle sur réseau.

Encadré 1 : Théorie formelle des collisions

La théorie formelle des collisions étudie le problème de la diffusion d'une particule par un potentiel $V(\mathbf{r})$ dans le vide. Pour caractériser la diffusion, on souhaite évaluer les éléments de matrice de S :

$$S_{fi} = \langle f|\tilde{U}(+\infty,-\infty)|i\rangle. \tag{B1-1}$$

i désigne l'état initial et f l'état final. $\tilde{U}(+\infty,-\infty)$ est l'opérateur d'évolution (en point de vue interaction) correspondant au branchement puis au débranchement adiabatique du potentiel diffuseur. Le calcul formel de la matrice S donne :

$$S_{fi} = \langle f|i\rangle - 2i\pi\delta(E_f - E_i)\langle f|T(E_i + i\eta)|i\rangle_{\eta\to 0}, \tag{B1-2}$$

E_i (E_f) est l'énergie de l'état i (f) non perturbé par V . La matrice T est donnée par :

$$T(E) = V + VG(E)V, \tag{B1-3}$$
$$G(E) = G_0(E) + G_0(E)VG(E), \tag{B1-4}$$

G (G_0) étant la résolvante de l'hamiltonien $H = H_0 + V$ (H_0).

Dans le modèle sur réseau, on considère les états $|\mathbf{r}\rangle$ normalisés par $\langle \mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}'\,\rangle = \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}/\ell^d$, ainsi que les états d'impulsion $|\mathbf{k}\rangle = \sum_{\mathbf{r}} \ell^d e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle$. Par construction du réseau, les vecteurs d'onde $\mathbf{k}$ sont restreints au domaine carré $\mathcal{D} = [-\pi/\ell, \pi/\ell[^d$. Avec ces définition, le potentiel (1.6) s'écrit :

$$V = g_0\,|\mathbf{r}=0\rangle\langle\mathbf{r}=0|, \tag{B1-5}$$

ce qui permet d'obtenir à partir des équations (B1-3) et (B1-4) :

$$\langle\mathbf{k}|T_{\text{grid}}(E+i\eta)|\mathbf{k}'\rangle = \frac{g_0}{1 - g_0\langle\mathbf{r}=0|G_0(E+i\eta)|\mathbf{r}=0\rangle}. \tag{B1-6}$$

Il reste à déterminer le propagateur libre pris à l'origine pour une particule de masse réduite $m/2$. On obtient son expression en passant dans l'espace de Fourier :

$$\langle\mathbf{r}=0|G_0(E+i\eta)|\mathbf{r}=0\rangle = \int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\frac{1}{E + i\eta - \hbar^2k^2/m}. \tag{B1-7}$$

On s'intéresse à la limite des petites énergies $E \ll \hbar^2/m\ell^2$ et on identifie les deux matrices T, ce qui donne l'égalité :

$$\frac{1}{T(E)} = \frac{1}{g_0} - \mathcal{I}(E) \tag{1.28}$$

L'intégrale $\mathcal{I}(E)$ se sépare en une partie réelle et une partie imaginaire selon la décomposition :

$$\frac{1}{E+i\eta} = \mathcal{PP}\frac{1}{E} - i\pi\delta(E). \tag{1.29}$$

La partie imaginaire de $\mathcal{I}(E)$ est égale à la densité d'état. Elle dépend de la dimension d mais, dans le domaine d'énergie choisi ($E \ll \hbar^2/m\ell^2$), elle ne dépend pas du fait qu'on ait pris (i) un modèle discret ou un modèle continu, (ii) le vrai potentiel ou un potentiel modèle. On en déduit que la partie imaginaire de l'égalité (1.28) est trivialement vérifiée et qu'elle ne nous fournit pas d'indication sur la valeur de g_0.

On considère donc la partie réelle de $\mathcal{I}(E)$ dont le résultat dépend de la dimension. On pose $E = \hbar^2 q^2/m$ et on prend la limite $q \to 0$.

- A 1D, on intègre directement sur k et on obtient :

$$\mathrm{Re}\,\mathcal{I}(E) = \frac{m\ell}{\pi^2\hbar^2} \tag{1.30}$$

  Pour le vrai potentiel, $T(E)$ tend vers une constante g pour $E \to 0$. La correction apportée par la partie réelle de $\mathcal{I}(E)$ est petite car $\ell \gg 1/\rho$ et nous verrons dans la section 1.4 que notre approche se restreint au régime $mg/\rho\hbar^2 \ll 1$. On obtient finalement :

$$g_0 = \frac{g}{1 + \dfrac{m\ell g}{\pi^2\hbar^2}} \tag{1.31}$$

- A 2D, on procède en deux étapes. On sépare le domaine $\mathcal{D}$ en un disque de rayon π/ℓ plus son complémentaire. Dans le domaine complémentaire, on peut prendre directement la limite $E = 0$ pour calculer la contribution à $\mathcal{I}(E)$. On trouve :

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(\frac{2G}{\pi} - \ln 2\right) \tag{1.32}$$

  où $G \simeq 0.91596\ldots$ est la constante de Catalan. Sur le disque, l'intégration ne fait pas de difficulté. En regroupant les deux contributions, on arrive à :

$$\mathrm{Re}\,\mathcal{I}(E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left[\ln\left(\frac{q\ell}{\pi}\right) + \left(\frac{2G}{\pi} - \ln 2\right) + \mathcal{O}((q\ell)^2)\right] \tag{1.33}$$

  Dans le cas continu, le calcul de la matrice T pour le vrai potentiel donne dans la limite des basses énergies :

$$\langle \mathbf{k}|T(E+i\eta)|\mathbf{k}'\rangle \simeq -\frac{2\pi\hbar^2}{m\left[\ln(aq/2) + C - i\pi/2\right]} \tag{1.34}$$

où a est la longueur de diffusion à 2D et $C = .57721\ldots$ la constante d'Euler. L'identification des parties réelles dans l'équation (1.28) donne finalement :

$$\frac{1}{g_0} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left[\ln\left(\frac{a}{\pi\ell}\right) - C + \frac{2G}{\pi}\right] \tag{1.35}$$

Nous verrons dans la section 1.4 la condition de validité de notre approche, $\hbar^2/mg_0 \gg 1$, qui conduit ici à l'inégalité :

$$\frac{1}{2\pi}\ln\left(\frac{\ell}{a}\right) \gg 1. \tag{1.36}$$

On doit donc être dans le régime de Born pour le traitement du pseudopotentiel.

- A 3D, on calcule directement la partie réelle de l'intégrale pour $E = 0$:

$$\mathrm{Re}\mathcal{I}(E) = \frac{m}{\hbar^2\ell} \times 0.194\ldots \tag{1.37}$$

Par ailleurs, la matrice T se calcule aussi dans le cas continu :

$$\langle \mathbf{k}|T(E+i\eta)|\mathbf{k}'\rangle \simeq \frac{4\pi\hbar^2}{m}\frac{1}{1/a + iq}, \tag{1.38}$$

et on obtient à partir de l'égalité (1.28) :

$$g_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m}\frac{a}{1 - \mathcal{K}a/\ell} \tag{1.39}$$

où $\mathcal{K} = 2.442\ldots$. On note $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ la constante de couplage usuelle. Pour les mêmes raisons physiques qu'à 2D, on a $\ell > a$ et donc $g_0 \simeq g$.

En conclusion, nous avons montré dans cette section que le potentiel de contact (1.6) est un potentiel modèle qui reproduit les comportements à basse énergie du vrai potentiel. Nous avons déterminé la relation entre la constante de couplage g_0 et la longueur de diffusion a. L'intérêt de l'approche sur réseau est qu'elle permet de s'affranchir des problèmes techniques des divergences ultraviolettes, la constante g_0 pouvant dépendre de ℓ.

1.4 Domaine de validité de notre approche

Cette section est l'occasion de présenter en détail le domaine de validité de notre approche. Certaines restrictions concernent la taille des boîtes ℓ qui est ajustable dans les limites que l'on va préciser. On en déduit cependant des conditions de validité qui ne dépendent plus de ℓ.

1. La première condition (1.13) est celle qui impose un grand nombre de particules dans chaque boîte, c'est-à-dire $\rho\ell^d \gg 1$. On peut la récrire $\ell \gg \rho^{-1/d}$: la taille des boîtes est plus grande que la distance moyenne entre atomes. On a donc une limite inférieure pour ℓ.

2. Par ailleurs, les conditions (1.1) imposent une limite supérieure à ℓ, à savoir la plus petite des longueurs λ et ξ.

3. Les restrictions 1 et 2 sur la longueur ℓ ne sont compatibles que si λ et ξ sont toutes deux supérieures à la distance moyenne entre particules, ce qu'on peut récrire :

$$\rho\,\lambda^d \gg 1, \tag{1.40}$$

$$\rho\,\xi^d \gg 1. \tag{1.41}$$

On obtient les deux premières conditions de validité de notre approche. La première est la condition de dégénérescence quantique qui est atteinte pour des températures suffisamment basses. La seconde correspond au régime d'interaction faible. Sa dépendance en la densité dépend de la dimension d'espace. A 1D et 3D, la prédiction champ moyen du potentiel chimique est $\mu = g\,\rho$. Par conséquent,

- A 1D, la condition (1.41) est une limite haute densité puisque $\rho\,\xi \simeq \hbar\sqrt{\rho/mg}$. La limite inverse $\hbar\sqrt{\rho/mg} \ll 1$ correspond au régime du gaz de Tonks.
- A 3D, g est reliée à la longueur de diffusion a par $g = 4\pi\hbar^2 a/m$, et la condition (1.41) donne

$$\rho\,\xi^3 \propto \frac{1}{\sqrt{\rho a^3}} \gg 1, \tag{1.42}$$

il s'agit donc d'un régime de basse densité.
- A 2D, la situation est différente car le potentiel chimique est de la forme $4\pi\hbar^2\rho/[m\ln(1/\rho a^2)]$ (voir l'équation (2.60)), où a est la longueur de diffusion. La condition (1.41) est donc une limite de basse densité :

$$\ln\left(\frac{1}{\rho\,a^2}\right) \gg 4\pi \tag{1.43}$$

4. Les conditions vues au 3. résultent de la discrétisation de l'espace. Malheureusement, on ne sait pas, d'une manière générale [1], diagonaliser exactement l'hamiltonien (1.4) car l'interaction entre atomes donne un terme quartique dans le champ atomique $\hat{\psi}$. La méthode que nous allons utiliser dans la suite est une approche perturbative où on développe l'hamiltonien en fonction de deux petits paramètres. L'hamiltonien peut s'écrire en représentation densité-phase si l'on remplace le champ $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ par son expression (1.24).

Dans le régime des quasicondensats qui nous intéresse, la densité fluctue peu autour de sa valeur moyenne. On écrit $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}) + \delta\hat{\rho}(\mathbf{r})$ et on développe en puissance de $\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})$. Le premier petit paramètre est donc :

$$\epsilon_1 = \frac{|\delta\hat{\rho}|}{\rho_0} \ll 1. \tag{1.44}$$

[1] sauf à 1D et sans potentiel extérieur, voir le travail de Lieb et Liniger [116, 117].

$|\delta\hat{\rho}|$ désigne les valeurs typiques prises par l'opérateur donnant les fluctuations de densité.

Le calcul des fluctuations relatives de densité est très semblable au calcul de la variance du nombre de particules dans une boîte (voir la sous-section (1.2.1) et notamment le résultat (1.11)). On a en fait deux contributions : la première en $1/\rho\ell^d$, qui est petite d'après la restriction 1., le calcul de la seconde est détaillé dans la **publication I** pour un gaz homogène.

Pour $k_BT < \mu$, la première contribution est dominante et

$$\epsilon_1^2 \simeq \frac{1}{\rho_0 \ell^d}. \tag{1.45}$$

Pour $k_BT > \mu$, on obtient :

$$\epsilon_1^2 \sim \frac{1}{\rho_0\ell} + \frac{k_BT}{\mu}\frac{1}{\rho_0\xi} \ll 1 \qquad \text{à 1D} \tag{1.46}$$

$$\epsilon_1^2 \sim \frac{1}{\rho_0\ell^2} + \frac{1}{\rho_0\lambda^2}\ln\left(\frac{k_BT}{\mu}\right) \ll 1 \qquad \text{à 2D} \tag{1.47}$$

$$\epsilon_1^2 \sim \frac{1}{\rho_0\ell^3} \ll 1 \qquad \text{à 3D} \tag{1.48}$$

Indépendamment du modèle sur réseau, on obtient, à 1D et à 2D, des conditions pour que les fluctuations de densité soient petites. Le potentiel chimique est limité inférieurement ce qui signifie physiquement des interactions suffisamment fortes [105]. La limite du gaz parfait n'est par conséquent pas traitable dans notre approche. Le passage du gaz parfait au quasicondensat (pour lequel les fluctuations de densité sont petites) peut être obtenu à 1D par une méthode de champ classique [104]. On confirme par cette méthode la restriction [2] (1.46).

5. Dans un quasicondensat, les fluctuations de phase sont importantes à grande distance. Ceci implique notamment que la matrice densité à un corps $g_1(\mathbf{r}) = \langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{0})\rangle$ tende vers zéro lorsque $|\mathbf{r}| \to +\infty$. Il n'y a donc pas d'ordre à longue portée, c'est-à-dire pas de condensation de Bose-Einstein. Cependant, on peut s'attendre à ce que les fluctuations de phase restent petites sur des courtes distances. Or, dans l'expression phase-densité de l'hamiltonien, la phase n'apparaît jamais seule mais toujours comme une différence de phase entre deux boîtes adjacentes. C'est donc notre second petit paramètre : on suppose que cette différence de phase est petite, c'est-à-dire :

$$\epsilon_2 = |l\nabla\hat{\theta}| \ll 1, \tag{1.49}$$

où le gradient sur réseau a la forme suivante :

$$\nabla f(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{f(\mathbf{r}+\ell\mathbf{e_j}) - f(\mathbf{r}-\ell\mathbf{e_j})}{2\ell}\mathbf{e_j}, \tag{1.50}$$

[2] Cette restriction peut d'ailleurs se récrire $\xi \ll \ell_c$ où $\ell_c = \rho\lambda^2/\pi$ est la longueur de cohérence de la matrice densité à un corps dont la décroissance est exponentielle à 1D. Physiquement cela signifie que la taille typique des fluctuations de phase ℓ_c est grande devant la taille typique des fluctuations de densité ξ.

appliqué à une fonction quelconque $f(\mathbf{r})$. Le calcul de ϵ_2 est détaillé dans la **publication I** pour un gaz homogène. On trouve :

$$\epsilon_2^2 \sim \frac{1}{\rho_0 \ell^d}. \tag{1.51}$$

Ces fluctuations sont donc petites, d'après la restriction 1.

6. Pour conclure, on notera qu'il nous reste de la marge sur le choix de ℓ entre $\rho^{-1/d}$ et λ ou ξ. On peut donc choisir ℓ de telle sorte que, dans les expressions (1.46) et (1.47) de ϵ_1^2, les deux termes de la somme soient du même ordre. Ainsi, on obtient :

$$\epsilon_1 \sim \epsilon_2 \simeq \frac{1}{\sqrt{\rho \ell^d}} \tag{1.52}$$

quelle que soit la dimension d'espace.

1.5 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre l'intérêt d'un modèle sur réseau afin de pouvoir contourner les problèmes liés à une définition précise de l'opérateur donnant la phase. Cette séparation de l'espace continu en petites boîtes est aussi nécessaire si l'on veut utiliser les fluctuations de densité comme petit paramètre dans notre approche. En quelque sorte, nous obtenons une description mésoscopique de l'état condensé où les champs sont moyennés sur la taille d'une boîte, chaque boîte contenant un grand nombre de particules. Cette approche discrète n'est valable que pour décrire les phénomènes à grandes longueurs d'onde, c'est-à-dire les modes de basse énergie.

Nous avons ensuite détaillé le choix du potentiel de contact entre atomes ainsi que son expression en fonction des caractéristiques du vrai potentiel. Puis nous avons précisé l'ensemble des conditions d'application de notre approche. On s'est ainsi restreint à des gaz en interaction faible à très basse température et présentant des faibles fluctuations de densité : c'est le régime des *quasicondensats*.

Chapitre 2

Développement perturbatif de l'hamiltonien

La section 1.4 du chapitre précédent résume l'ensemble des conditions d'application de notre approche. Nous considérons donc un gaz de bosons dégénérés et en interaction faible présentant des faibles fluctuations de densité [1] : c'est le régime des quasicondensats.

Le choix d'une approche phase-densité nous a conduit à construire un modèle sur réseau, représenté figure 1.1, où l'espace physique est séparé en petites boîtes de taille ℓ. Dans ce modèle et pour le régime que nous considérons, nous avons pu identifier deux petits paramètres qui sont du même ordre : les fluctuations relatives de densité et la différence de phase entre deux boîtes voisines.

Le principe de notre approche consiste à effectuer un développement perturbatif de l'hamiltonien modèle (1.4), en utilisant les petits paramètres en ϵ_1 et ϵ_2 en point de vue phase-densité. Cette idée est aussi à la base de la théorie originelle de Bogoliubov [99], pour laquelle le petit paramètre est l'occupation des modes non condensés par rapport à l'occupation macroscopique du mode du condensat.

Dans ce chapitre, nous allons détailler notre développement perturbatif de l'hamiltonien en fonction des petits paramètres. A l'ordre le plus bas, nous retrouvons l'équation de Gross-Pitaevskii pour $\sqrt{\rho_0}$ où ρ_0 est la densité du quasicondensat. La quadratisation de l'hamiltonien donne une forme diagonalisable à partir de laquelle on obtient les modes de Bogoliubov ainsi qu'une expression pour l'énergie du fondamental qui coïncide avec celle que prédirait la théorie de Bogoliubov. La cubisation de l'hamiltonien, qui intervient de façon perturbative dans le formalisme, est nécessaire dans le cadre d'une approche cohérente où les observables sont calculées au 2^{e} ordre en $\epsilon_{1,2}$. Le formalisme perturbatif étant établi, on va calculer les expressions générales de l'équation d'état et des fonction de corrélation du 1^{er} et du 2^{e} ordre. On montrera en particulier que les prédictions obtenues ne dépendent pas de l'énergie de coupure $\hbar^2/m\ell^2$, due à la discrétisation de l'espace, ce qui signifie qu'aucune intégrale ne diverge lorsqu'on fait tendre, à la fin des calculs, la taille du réseau ℓ vers zéro. Nos résultats sont finalement

[1] avec notre approche, on ne peut notamment pas traiter le cas du gaz parfait 1D ou 2D pour lequel les fluctuations de densité sont importantes.

appliqués au cas du gaz homogène, pour lequel on explicite l'équation d'état ou la fonction de corrélation du 1$^{\text{er}}$ ordre afin de les comparer aux nombreux résultats existant déjà dans la littérature.

2.1 Résolution perturbative ordre par ordre

2.1.1 Développement de l'hamiltonien

On récrit l'hamiltonien (1.4) en point de vue densité-phase en utilisant la décomposition (1.24) de l'opérateur champ atomique. Les contributions du potentiel de piégeage et des interactions sont locales et ne couplent pas les différentes boîtes :

$$H_{\text{pot}} = \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \hat{\rho}(\mathbf{r}) \left[U(\mathbf{r}) - \mu + \frac{g_0}{2} \left(\hat{\rho}(\mathbf{r}) - \frac{1}{\ell^d} \right) \right]. \tag{2.1}$$

Le terme d'énergie cinétique couple quant à lui les différentes boîtes. Il fait intervenir explicitement l'opérateur donnant la phase :

$$H_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m\ell^2} \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \sum_j \sqrt{\hat{\rho}} \left(e^{i(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta})} \sqrt{\hat{\rho}_{+j}} + e^{i(\hat{\theta}_{-j} - \hat{\theta})} \sqrt{\hat{\rho}_{-j}} - 2\sqrt{\hat{\rho}} \right). \tag{2.2}$$

On utilise les notations $\hat{\theta}_{\pm j} = \hat{\theta}(\mathbf{r} \pm \ell \mathbf{e_j})$ et $\hat{\rho}_{\pm j} = \hat{\rho}(\mathbf{r} \pm \ell \mathbf{e_j})$. Comme nous l'avons déjà fait remarquer dans la section 1.4, cette dernière expression a le gros avantage de ne faire intervenir que des différences de phase entre boîtes voisines. Cette différence est l'un de nos petits paramètres. On développe donc dans l'hamiltonien les exponentielles des différences de phase selon :

$$e^{i(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta})} = 1 + i(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta}) - \frac{1}{2}(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta})^2 \ldots \tag{2.3}$$

Pour le second petit paramètre, on écrit la densité sous la forme $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}) + \delta\hat{\rho}(\mathbf{r})$ où ρ_0 est la densité du gaz à l'ordre le plus bas en $\epsilon_{1,2}$. Le second petit paramètre est $|\delta\hat{\rho}|/\rho_0$ et on développe les expressions (2.1) et (2.2) selon :

$$\hat{\rho}^{1/2} = \rho_0^{1/2} + \frac{1}{2}\frac{\delta\hat{\rho}}{\rho_0^{1/2}} - \frac{1}{8}\frac{\delta\hat{\rho}^2}{\rho_0^{3/2}} + \frac{1}{16}\frac{\delta\hat{\rho}^3}{\rho_0^{5/2}} \ldots \tag{2.4}$$

Les calculs du développement de l'hamiltonien :

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + \ldots \tag{2.5}$$

détaillés dans l'appendice A de la **publication II**, conduisent aux résultats suivant :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\rho_0}\Delta\sqrt{\rho_0} + \frac{g_0}{2}\rho_0^2 + (U(\mathbf{r}) - \mu)\rho_0 \right], \tag{2.6a}$$

$$H_1 = \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \left[-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{\rho_0}}\Delta\sqrt{\rho_0} + U(\mathbf{r}) - \mu + g_0\rho_0 \right] \delta\hat{\rho}, \tag{2.6b}$$

$$\begin{aligned} H_2 = E_2[\rho_0] + \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \Bigg[& -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta\hat{\rho}}{2\sqrt{\rho_0}}\Delta\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{2\sqrt{\rho_0}}\right) + \frac{\hbar^2\delta\hat{\rho}^2}{8m\rho_0^{3/2}}\Delta\sqrt{\rho_0} + \frac{g_0}{2}\delta\hat{\rho}^2 \\ & + \frac{\hbar^2}{2m}\sum_j \sqrt{\rho_0(\mathbf{r})\rho_0(\mathbf{r}+\ell\mathbf{e_j})}\,\frac{(\hat{\theta}(\mathbf{r}+l\mathbf{e_j}) - \hat{\theta}(\mathbf{r}))^2}{\ell^2} \Bigg], \end{aligned} \tag{2.6c}$$

$$\begin{aligned} H_3 = & -\frac{g_0}{2}\sum_{\mathbf{r}} \delta\hat{\rho} + \frac{\hbar^2}{4m\ell^2}\sum_{\mathbf{r},j} \ell^d\,(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta})\left(\frac{\rho_{0,+j}^{1/2}}{\rho_0^{1/2}}\,\delta\hat{\rho} + \frac{\rho_0^{1/2}}{\rho_{0,+j}^{1/2}}\,\delta\hat{\rho}_{+j}\right)(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta}) \\ & + \frac{\hbar^2}{8m}\sum_{\mathbf{r}} \frac{\delta\hat{\rho}}{\rho_0}\left(\rho_0^{-1/2}\Delta\rho_0^{1/2} - \rho_0^{1/2}\Delta\rho_0^{-1/2}\right) \\ & - \frac{\hbar^2}{16m}\sum_{\mathbf{r}} \ell^d \left[\frac{\delta\hat{\rho}^3}{\rho_0^{5/2}}\Delta\sqrt{\rho_0} - \frac{\delta\hat{\rho}^2}{\rho_0^{3/2}}\Delta\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.6d}$$

$E_2[\rho_0]$, qui apparaît dans H_2, est un nombre qui dépend de la densité ρ_0 et de taille du réseau ℓ. Son expression est donnée dans l'appendice A de la **publication II**.

Dans les sous-sections qui suivent, nous allons montrer succinctement comment résoudre ordre par ordre l'hamiltonien H, le lecteur intéressé par les détails pourra se référer à la **publication II**.

2.1.2 Ordre zéro

A l'ordre le plus bas en $\epsilon_{1,2}$, H_0 est simplement un nombre complexe. Sa minimisation implique que $\sqrt{\rho_0(\mathbf{r})}$ est solution de l' équation de Gross-Pitaevskii :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) - \mu + g_0\rho_0\right]\sqrt{\rho_0} = 0. \tag{2.7}$$

Cette équation donne le profil de densité du quasicondensat et les fluctuations de densité autour de cette valeur sont petites dans notre approche.

Notre traitement est grand canonique, c'est-à-dire que l'on fixe le potentiel chimique μ. On peut, à partir de l'équation (2.7), calculer le nombre de particules $N_0 \equiv \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \rho_0(\mathbf{r})$ du quasicondensat. A l'ordre le plus bas en $\epsilon_{1,2}$, N_0 est égal au nombre d'atomes N du gaz. Nous verrons cependant que ce n'est plus le cas lorsqu'on va à des ordres supérieurs en $\epsilon_{1,2}$.

L'équation (2.7) établit en fait une relation bijective entre le potentiel chimique μ et la densité ρ_0 donc entre le potentiel chimique μ et N_0. Au lieu de paramétrer

les expressions en fonction de μ, on peut donc les paramétrer en fonction de N_0. En particulier, le potentiel chimique est une fonction de N_0 que l'on écrit :

$$\mu = \mu_0(N_0). \tag{2.8}$$

Cette propriété importante va nous permettre dans la sous-section 2.2.1 de dériver une équation d'état pour le gaz. De la même façon, la densité ρ_0 devient une fonction de N_0 : $\rho_0(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}, N_0)$. $\rho_0(\mathbf{r}, N_0)$ est le profil de densité vérifiant l'équation de Gross-Pitaevskii (2.7) et tel que le nombre de particules $\sum_{\mathbf{r}} \ell^d \rho_0(\mathbf{r})$ soit égal à N_0. Le potentiel chimique dans l'équation (2.7) est alors ajusté en conséquence.

On va se servir de ces propriétés pour montrer une expression assez formelle que nous utiliserons dans la sous-section 2.2.2 afin de déterminer l'énergie de l'état fondamental. Si on se restreint pour le profil $\rho_0(\mathbf{r}, N_0)$ à l'ensemble des fonctions qui vérifient l'équation de Gross-Pitaevskii (2.7) et que l'on fixe le potentiel chimique μ, H_0 devient une fonction de N_0 que l'on peut écrire sous la forme $H_0(N_0) = E_0(N_0) - \mu N_0$ où $E_0(N_0)$ est l'énergie de Gross-Pitaevskii donnée par :

$$E_0(N_0) = \sum \ell^d \Big[-\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\rho_0(N_0)} \Delta \sqrt{\rho_0(N_0)} + \frac{g_0}{2} \rho_0(N_0)^2 + U(\mathbf{r}) \rho_0(N_0) \Big] \tag{2.9}$$

où l'on a écrit $\rho_0(N_0)$ pour $\rho_0(\mathbf{r}, N_0)$. La minimisation de $H_0(N_0)$ par rapport à N_0 donne $dE_0/dN_0 = \mu$, ce qui, conjugué à l'équation (2.8), conduit à :

$$\frac{dE_0}{dN_0}(N_0) = \mu_0(N_0). \tag{2.10}$$

$\mu_0(N_0)$ est donc la dérivée première de l'énergie de Gross-Pitaevskii $E_0(N_0)$.

Le choix du profil de densité étant imposé par (2.7), on constate que la correction H_1 est nulle. On va donc maintenant résoudre le problème défini par l'hamiltonien $H_0 + H_2$.

2.1.3 Transformation de Bogoliubov

Le développement de l'hamiltonien H restreint aux ordres inférieurs ou égaux à 2 en $\epsilon_{1,2}$ est quadratique dans les opérateurs $\delta\hat{\rho}$ et $\hat{\theta}$ si bien que sa diagonalisation ne pose pas de difficulté. Les étapes de cette diagonalisation sont en fait très semblables à l'approche phase-densité pour un champ atomique classique [2] : on écrit les équations du mouvement de Heisenberg qui sont linéaires et donc simplement solubles. On obtient des équations de type hydrodynamique incluant les termes dit de pression quantique. En utilisant le fait que $\sqrt{\rho_0}$ satisfait à l'équation de Gross-Pitaevskii (2.7), on peut montrer qu'il existe une simple transformation canonique qui permet d'obtenir l'équation des modes de Bogoliubov pour l'opérateur :

$$\hat{B} = \frac{\delta\hat{\rho}}{2\sqrt{\rho_0}} + i\sqrt{\rho_0}\,\hat{\theta}, \tag{2.11}$$

[2] une approche phase-densité quantique a été développée [123] mais sans définition convaincante de la phase.

et pour son conjugué $\hat{B}^\dagger$, à partir de ces équations hydrodynamiques.

Le nouvel opérateur que l'on a introduit a des relations de commutation bosoniques :

$$[\hat{B}(\mathbf{r}), \hat{B}^\dagger(\mathbf{r}')] = \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{\ell^d}, \tag{2.12}$$

ce qu'on montre à partir des relations de commutation (1.25). En utilisant la transformation (2.11), on montre finalement que l'hamiltonien H_2 peut se récrire sous la forme :

$$H_2 = \ell^d \sum_{\mathbf{r}} \hat{B}^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U + g_0\rho_0 - \mu \right) \hat{B} + g_0\rho_0 \left[\hat{B}^\dagger\hat{B} + \frac{1}{2}\left(\hat{B}^2 + \hat{B}^{\dagger 2} \right) \right] \tag{2.13}$$

où la fonction $E_2[\rho_0]$ a disparu dans les calculs, compensée par les contributions des commutateurs.

On retrouve ici l'hamiltonien de Bogoliubov où l'opérateur $\hat{B}$ remplace l'opérateur $\hat{\psi}$ (voir **encadré** 2). On peut donc réutiliser les résultats standard sur la diagonalisation de cet hamiltonien [101, 70]. On en résume ici les étapes principales. On introduit les modes propres (u_s, v_s), d'énergie $\epsilon_s > 0$, de l'opérateur de Bogoliubov $\mathcal{L}_{\rm GP}$, où

$$\mathcal{L}_{\rm GP} \equiv \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U - \mu + 2g_0\rho_0 & g_0\rho_0 \\ -g_0\rho_0 & -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U - \mu + 2g_0\rho_0 \right) \end{pmatrix}. \tag{2.14}$$

Ces modes peuvent être normalisés selon l'équation :

$$\sum_{\mathbf{r}} \ell^d \left[|u_s(\mathbf{r})|^2 - |v_s(\mathbf{r})|^2 \right] = 1. \tag{2.15}$$

A chaque mode (u_s, v_s), on peut associer un autre mode propre de $\mathcal{L}_{\rm GP}$, (v_s^*, u_s^*), de valeur propre $-\epsilon_s < 0$.

Les autres modes nécessaires à la diagonalisation [3] $\mathcal{L}_{\rm GP}$ sont le mode d'énergie nulle $(\phi_0, -\phi_0)$ et le mode anormal (ϕ_a, ϕ_a), où on a défini :

$$\phi_0 = \sqrt{\rho_0/N_0} \qquad \text{et} \qquad \phi_a = \sqrt{N_0}\partial_{N_0}\sqrt{\rho_0}. \tag{2.17}$$

Maintenant qu'on a précisé la forme du spectre de $\mathcal{L}_{\rm GP}$, on définit les projections de $(\hat{B}, \hat{B}^\dagger)$ sur ces modes propres et sur le mode anormal selon :

$$\begin{pmatrix} \hat{B} \\ \hat{B}^\dagger \end{pmatrix} \equiv -i\sqrt{N_0}\hat{Q} \begin{pmatrix} \phi_0 \\ -\phi_0 \end{pmatrix} + \frac{\hat{P}}{\sqrt{N_0}} \begin{pmatrix} \phi_a \\ \phi_a \end{pmatrix} + \sum_s \quad \hat{b}_s \begin{pmatrix} u_s \\ v_s \end{pmatrix} + \hat{b}_s^\dagger \begin{pmatrix} v_s^* \\ u_s^* \end{pmatrix}. \tag{2.18}$$

[3] En fait, l'opérateur $\mathcal{L}_{\rm GP}$ n'est pas formellement diagonalisable tandis que $\mathcal{L}_{\rm GP}^2$ l'est. $\mathcal{L}_{\rm GP}$ possède un ensemble de modes propres d'énergies $\pm\epsilon_s$ mais, dans l'espace noyau de l'opérateur $\mathcal{L}_{\rm GP}^2$ correspondant au mode anormal et au mode d'énergie nulle, $\mathcal{L}_{\rm GP}$ est nilpotente et a la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.16}$$

où $\alpha = N_0\ d\mu_0/dN_0$.

Encadré 2 : Lien avec l'approche de Bogoliubov

Le développement que nous présentons dans cette section est bien sûr valable dans le cas particulier d'un condensat de Bose-Einstein. Nous verrons notamment dans la suite que les résultats du calcul des observables physiques coïncident avec les prédictions de la théorie de Bogoliubov lorsqu'on a un condensat de Bose-Einstein.
Par conséquent, il n'est pas vraiment étonnant que l'on retrouve le spectre de Bogoliubov et que, plus généralement, notre approche présente de nombreuses similitudes avec l'approche de Bogoliubov. Cet encadré est l'occasion de préciser les simplifications qui sont introduites dans le formalisme lorsqu'il y a un condensat, auquel cas notre approche revient exactement à celle de Bogoliubov.
Le mode macroscopiquement peuplé du condensat est associé à un profil de densité qui est donné par l'équation de Gross-Pitaevskii à l'ordre le plus bas de la théorie de Bogoliubov. A cet ordre, la fonction $\phi_0(\mathbf{r})$ s'interprète donc comme le mode du condensat et $\rho_0(\mathbf{r})$ est la densité correspondante.
Les fluctuations quantiques et thermiques autour du mode du condensat sont petites dans la théorie de Bogoliubov. Cette propriété correspond dans notre approche à supposer que l'opérateur $\hat{\theta} + \hat{Q}$ est petit (on pourra oublier $\hat{Q}$ dans la suite en remarquant qu'il disparaît de l'hamiltonien et des observables). On développe par conséquent l'expression du champ atomique (1.24) en fonction de la phase et des fluctuations de densité et on obtient au premier ordre de ce développement que l'opérateur $\hat{B}$ s'identifie exactement aux fluctuations du champ notées $\delta\hat{\psi}$. On retrouve finalement avec notre approche les équations de Bogoliubov appliquées à $\delta\hat{\psi}$ et $\delta\hat{\psi}^\dagger$.
Physiquement, le fait que la phase quantique soit petite signifie que la phase est cohérente sur l'ensemble du gaz. Cette cohérence est en fait nécessaire à l'existence d'un ordre à longue portée, lui-même caractéristique d'un gaz condensé selon le critère de Penrose et Onsager. L'originalité de notre approche est de montrer que la cohérence de la phase sur l'ensemble du gaz n'est pas nécessaire pour appliquer une méthode perturbative à la Bogoliubov. Seule la différence de phase entre deux boîtes doit être petite, c'est-à-dire que la longueur typique de décohérence de phase doit être plus grande que ξ et λ.

Les opérateurs $\hat{b}_s$ sont des opérateurs bosoniques de destruction aux relations de commutation usuelles $[\hat{b}_s, \hat{b}^\dagger_{s'}] = \delta_{s,s'}$. Ils commutent avec les opérateurs $\hat{Q}$ et $\hat{P}$. A partir de cette expression, on récrit les opérateurs donnant la phase et les fluctuations de densité :

$$\hat{\theta}(\mathbf{r}) = -\hat{Q} + \sum_s \theta_s(\mathbf{r})\,\hat{b}_s + \theta^*_s(\mathbf{r})\,\hat{b}^\dagger_s \tag{2.19}$$

$$\delta\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{P}\,\partial_{N_0}\rho_0 + \sum_s \delta\rho_s(\mathbf{r})\hat{b}_s + \delta\rho^*_s(\mathbf{r})\hat{b}^\dagger_s \tag{2.20}$$

avec

$$\begin{aligned} \theta_s(\mathbf{r}) &= \frac{u_s(\mathbf{r}) - v_s(\mathbf{r})}{2i\sqrt{\rho_0(\mathbf{r})}}, \\ \delta\rho_s(\mathbf{r}) &= \sqrt{\rho_0(\mathbf{r})}\,(u_s(\mathbf{r}) + v_s(\mathbf{r})). \end{aligned} \tag{2.21}$$

Interprétation physique des opérateurs $\hat{Q}$ et $\hat{P}$ [127]

Comme on le voit dans l'expression de la phase quantique (2.19), $\hat{Q}$ est une coordonnée collective correspondant au degré de liberté du choix de l'origine pour les phases. Ce degré de liberté est une conséquence de l'invariance $U(1)$ de l'hamiltonien (1.4). Les phases n'apparaissant que comme des différences, l'opérateur $\hat{Q}$ ne peut pas apparaître dans l'expression de l'hamiltonien (1.4).

$\hat{P}$ est le moment canoniquement conjugué à la variable $\hat{Q}$ car on montre, à partir de l'équation (2.18), la relation de commutation suivante :

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = -i. \tag{2.22}$$

Physiquement, $\hat{P}$ décrit les fluctuations du nombre total d'atomes. En effet, si on note $\hat{N}$ l'opérateur donnant le nombre d'atomes, on montre que

$$\hat{N} \equiv \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \hat{\rho}(\mathbf{r}) = N_0 + \hat{P}, \tag{2.23}$$

où on a utilisé la propriété

$$\sum_{\mathbf{r}} \ell^d \phi_0(\mathbf{r})\,[u_s(\mathbf{r}) + v_s(\mathbf{r})] = 0. \tag{2.24}$$

Le fait que $\hat{Q}$, qui décrit une phase quantique globale, soit conjugué à $\hat{P}$ qui décrit un nombre d'atomes est le pendant quantique de la conjugaison entre la densité et la phase pour un champ classique.

Diagonalisation de $H_0 + H_2$

On insère la décomposition (2.18) dans l'expression de l'hamiltonien H_2 (2.13) et on obtient :

$$H_0 + H_2 = \sum_s \epsilon_s \hat{b}_s^\dagger \hat{b}_s + \frac{1}{2}\hat{P}^2 \mu_0' + \tilde{E}_2[\rho_0], \tag{2.25}$$

avec $\mu_0' = d\mu_0/dN_0$. La fonction $\tilde{E}_2[\rho_0]$ est l'énergie du fondamental de l'hamiltonien grand canonique $H \simeq H_0 + H_2$. L'hamiltonien (2.25) est donc la somme d'oscillateurs harmoniques indépendants de fréquences $\epsilon_s/\hbar$ et d'une particule libre massive 1D dont la position est décrite par la variable de phase $\hat{Q}$.

La forme diagonalisée très simple que nous avons obtenue pour l'hamiltonien quadratique $H_0 + H_2$ est parfaitement adaptée au calcul d'observables. Si $\mathcal{O}$ est un opérateur, sa valeur moyenne calculée avec l'hamiltonien H_2 (qui est la même que celle calculée avec l'hamiltonien $H_0 + H_2$) est donnée par

$$\langle \mathcal{O} \rangle_2 = \frac{\mathrm{Tr}\left[\mathcal{O} e^{-\beta H_2}\right]}{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H_2}\right]}, \tag{2.26}$$

où $\beta = 1/k_B T$. La forme quadratique de H_2 conduit à des calculs simples notamment grâce à l'utilisation possible du théorème de Wick (voir **encadré** 3).

2.1.4 Terme cubique

Le terme cubique H_3 de l'hamiltonien apparaît à un ordre supérieur dans notre approche perturbative. Il décrit une physique très riche d'interactions entre les modes de Bogoliubov, qui sont apparus dans la diagonalisation de H_2, conduisant à des décalages dans les énergies de ces modes ainsi qu'à des processus d'amortissement de Beliaev-Landau de ces modes. Ces phénomènes ont déjà été largement étudiés dans le cadre des condensats de Bose-Einstein [128, 129, 130].

Pour ce qui nous intéresse, à savoir le calcul de certaines observables comme les fonctions de corrélation g_1 et g_2 ou l'équation d'état, on souhaite inclure H_3 de façon perturbative. En effet, si on calcule par exemple la valeur moyenne de $\delta\hat{\rho}$ avec H_2, voir (2.26), on trouve que celle-ci est nulle. On ne retrouve pas ainsi les prédictions de la théorie de Bogoliubov sur la déplétion du mode du condensat due aux interactions. Pour retrouver l'équivalence avec la théorie de Bogoliubov, il faut donc inclure les corrections due à H_3. D'une façon plus générale, pour le calcul d'observables à l'ordre 2 en $\epsilon_{1,2}$, il faut, dans une approche cohérente, tenir compte des termes perturbatifs dus à H_3.

Il existe deux méthodes pour calculer ces corrections :

1. la première, très générale, consiste à écrire la formule donnant les corrections aux valeurs moyennes prises avec l'hamiltonien H_2 que l'on note $\langle \ldots \rangle_2$:

$$\langle \hat{O} \rangle_3 \simeq \langle \hat{O} \rangle_2 - \int_0^\beta d\tau \, \langle e^{\tau H_2} H_3 e^{-\tau H_2} \hat{O} \rangle_2 \tag{2.27}$$

   $\hat{O}$ désignant un opérateur quelconque et $\langle \ldots \rangle_3$ la valeur moyenne corrigée. On peut ensuite calculer explicitement les corrections en remplaçant $\hat{\theta}$ et $\delta\hat{\rho}$ par leurs expressions (2.19) et (2.20) en fonction des opérateurs $\hat{b}_s$, $\hat{Q}$ et $\hat{P}$ dont on connaît les valeurs moyennes calculées avec l'hamiltonien H_2.

   Cette méthode est générale mais reste le plus souvent impraticable car techniquement trop ardue.

2. une seconde méthode, quoique moins générale, donne des calculs moins pénibles.

   Elle consiste à écrire les équations du mouvement avec l'hamiltonien H_2+H_3 pour les opérateurs $\hat{\theta}$ et $\delta\hat{\rho}$. Ces équations sont non linéaires, leurs parties linéaires correspondant aux équations hydrodynamiques déjà mentionnées dans la sous-section 2.1.3. On prend donc la valeur moyenne des termes linéaires avec l'hamiltonien $H_2 + H_3$ et la valeur moyenne pour les termes quadratiques avec l'hamiltonien H_2.

   On obtient ainsi des équations reliant $\langle \hat{\theta} \rangle_3$ et $\langle \delta\hat{\rho} \rangle_3$, qui sont les deux quantités qui nous intéressent, aux valeurs moyennes du type $\langle \ldots \rangle_2$ que l'on sait calculer.

Les calculs correspondant à la seconde méthode sont détaillés dans la **publication II**. On ne donne ici que les résultats généraux. On obtient tout d'abord

que $\langle\hat{\theta}\rangle_3$ ne dépend pas de la position, ce qui est un résultat attendu (sinon on aurait un courant permanent).

Les corrections à la densité sont résumées dans l'expression suivante :

$$\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3(\mathbf{r}) = \delta\rho_{\mathrm{GC}}(\mathbf{r}) + 2\phi_0(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}) + \langle\hat{\Lambda}^+(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\rangle_2. \tag{2.28}$$

$\delta\rho_{\mathrm{GC}}(\mathbf{r})$ provient des fluctuations du nombre de particules dans le gaz dues à l'utilisation de l'ensemble grand canonique. Ce terme ne serait pas présent si on s'était placé dans un ensemble canonique correspondant à la réalité physique dans les expériences de gaz froids.

L'opérateur $\hat{\Lambda}$ se définit comme le projeté de $\hat{B}$, débarrassé des opérateurs $\hat{P}$ et $\hat{Q}$, orthogonalement à ϕ_0 :

$$\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) \equiv (1 - |\phi_0\rangle\langle\phi_0|)\left(\hat{B}(\mathbf{r}) + i\sqrt{N_0}\hat{Q}\phi_0(\mathbf{r}) - \frac{1}{\sqrt{N_0}}\hat{P}\phi_a(\mathbf{r})\right). \tag{2.29}$$

Sa décomposition sur les opérateurs $\hat{b}_s$ est par conséquent la suivante :

$$\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) = \sum_s u_{s\perp}(\mathbf{r})\hat{b}_s + v_{s\perp}(\mathbf{r})\hat{b}_s^\dagger, \tag{2.30}$$

le symbole $\perp$ indiquant une projection orthogonale à ϕ_0 [4].

La fonction $\chi(\mathbf{r})$ est l'unique solution de l'équation

$$0 = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U + 3g_0\rho_0 - \mu\right]\chi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}S(\mathbf{r}), \tag{2.31}$$

où le terme source $S(\mathbf{r})$ est donné par

$$\begin{aligned} S(\mathbf{r}) \equiv\ & g_0 N_0 \phi_0(\mathbf{r})\langle 4\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) + \hat{\Lambda}^2(\mathbf{r}) + \hat{\Lambda}^{\dagger 2}(\mathbf{r}) - \phi_0^2(\mathbf{r})\rangle_2 \\ & - \sum_{\mathbf{r}'} \ell^d\, g_0\rho_0(\mathbf{r}')\phi_0(\mathbf{r}')\langle\{\hat{\Lambda}(\mathbf{r}') + \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}'), \hat{\Lambda}(\mathbf{r})\}\rangle_2. \end{aligned} \tag{2.32}$$

Dans le cas où on a un condensat de Bose-Einstein, on peut donner une interprétation physique à $\chi(\mathbf{r})$: la partie de $\chi(\mathbf{r})/N_0$ orthogonale à ϕ_0 est la correction à la prédiction de Gross-Pitaevskii $\phi_0(\mathbf{r})$ pour la fonction d'onde du condensat, due aux interactions avec les atomes non condensés. La partie de $\chi(\mathbf{r})$ colinéaire à $\phi_0(\mathbf{r})$ décrit la déplétion du condensat et $\langle\hat{\Lambda}^+(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\rangle_2$ est la densité d'atomes non condensés.

2.2 Calcul des observables

Nous allons maintenant appliquer le formalisme construit dans la section précédente pour calculer les observables suivantes :

- l'équation d'état, qui donne le potentiel chimique μ en fonction de la température et du nombre de particules.

[4] dans le cas d'un gaz homogène, ϕ_0 ne varie pas spatialement et est orthogonale aux fonctions u_s et v_s. Par conséquent, $u_{s\perp} = u_s$ et $v_{s\perp} = v_s$.

- l'énergie de l'état fondamental. L'équation d'état à température nulle peut aussi être obtenue en dérivant cette énergie par rapport au nombre de particules.
- les fonctions de corrélation du premier ordre g_1 et du second ordre g_2, qu'on appelle aussi matrice densité à un et deux corps.

La **publication II** détaille les calculs correspondants et nous ne donnons dans cette section que les conclusions.

2.2.1 Équation d'état

A l'ordre le plus bas de notre approche, on a un quasicondensat pur et la densité est égale à $\rho_0(\mathbf{r})$, où $\sqrt{\rho_0}$ vérifie l'équation de Gross-Pitaevskii (2.7). Par conséquent, on obtient $N = N_0$ et $\mu = \mu_0(N)$ pour le potentiel chimique, celui-ci étant égal par définition à $\mu_0(N_0)$ (voir l'expression (2.8)).

A l'ordre 2 en $\epsilon_{1,2}$, l'équation (2.28) donne une correction à ce profil de densité. En effet, l'intégration de (2.28) conduit à une expression pour la valeur moyenne du nombre total d'atomes :

$$N \equiv \langle \hat{N} \rangle \equiv N_0 + \delta N \quad \text{avec} \tag{2.33}$$

$$\delta N \simeq \delta N_{\mathrm{GC}} + \ell^d \sum_{\mathbf{r}} 2\phi_0(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}) + \ell^d \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\rangle_2. \tag{2.34}$$

L'équation d'état découle immédiatement de cette dernière expression. On remplace N_0 par $N - \delta N$ dans l'équation (2.8) donnant μ, puis on développe l'expression obtenue au premier ordre en δN :

$$\mu = \mu_0(N - \delta N) \simeq \mu_0(N) - \delta N \mu_0'(N), \tag{2.35}$$

$\mu_0(N)$ s'identifie comme la valeur qu'aurait le potentiel chimique si tous les atomes du gaz étaient dans le quasicondensat dont le profil de densité est prédit par l'équation de Gross-Pitaevskii (2.7). Ce terme, égal par exemple à $g_0 N/V$ pour un gaz homogène, est la prédiction *champ moyen* du potentiel chimique.

Le calcul de δN permet donc de déterminer les corrections au potentiel chimique au-delà du champ moyen. On insère l'expression (2.34) dans l'équation (2.35) et on obtient après quelques manipulations algébriques détaillées dans la **publication II** le résultat suivant :

$$\begin{aligned} \mu \simeq \mu_0(N) + k_B T \frac{\mu_0''}{2\mu_0'} - \mu_0'(N_0) \left(\frac{1}{2} + \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \langle \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\rangle_2 \right) \\ + \sum_{\mathbf{r}} \ell^d g_0 \left(\partial_{N_0}\rho_0(\mathbf{r})\right) \left(2\langle \hat{\Lambda}^\dagger\hat{\Lambda}\rangle_2 + \mathrm{Re}\langle \hat{\Lambda}^2\rangle_2 \right) \\ - \sum_{\mathbf{r}} \ell^d g_0 \phi_0^3(\mathbf{r}) \langle \{\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) + \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\gamma}\}\rangle_2. \end{aligned} \tag{2.36}$$

Le second terme après le signe égal provient du choix de l'ensemble grand canonique et peut donc être oublié pour l'ensemble canonique. On a introduit l'opérateur :

$$\hat{\gamma} = \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \phi_a(\mathbf{r}) \hat{\Lambda}(\mathbf{r}). \tag{2.37}$$

Dans le cas d'un gaz homogène, l'opérateur $\hat{\gamma}$ et μ_0'' sont nuls. Finalement, le résultat qu'on a obtenu pour l'équation d'état est le même que celui qu'on aurait obtenu en utilisant la théorie de Bogoliubov. Pourtant la dérivation que nous avons utilisée ne nécessite à aucun moment la présence d'un condensat (voir **encadré** 2).

2.2.2 Énergie de l'état fondamental

Le calcul de l'énergie de l'état fondamental donne aussi le même résultat que celui que donnerait la théorie de Bogoliubov, qu'un condensat soit présent ou non.

Pour déterminer $\tilde{E}_2$, l'énergie de l'état fondamental de $H_0 + H_2$, on se place dans le vide des opérateurs $\hat{b}_s$ et $\hat{P}$ et on calcule la valeur moyenne dans ce vide de H_2 donné par l'équation (2.13). On obtient, en écrivant $H_0 = E_0(N_0) - \mu N_0$:

$$\tilde{E}_2 = E_0(N_0) - \mu N_0 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r}} \ell^d g_0\, \rho_0\, \phi_0^2 - \sum_s \epsilon_s \langle v_{s\perp} | v_{s\perp}\rangle. \tag{2.38}$$

où $\rho_0(\mathbf{r})$ est solution de l'équation de Gross-Pitaevskii (2.7). On a déterminé ici l'énergie du fondamental de l'hamiltonien grand canonique (1.4). Celle-ci ne donne cependant pas l'énergie interne du fondamental, qu'on va noter E_{fond}, car l'hamiltonien grand canonique contient le terme $-\mu\hat{N}$ en plus du terme donnant l'énergie interne. On détermine par conséquent E_{fond} en ajoutant μN à $\tilde{E}_2$ et en développant E_0 en fonction de δN. Un calcul intermédiaire donne :

$$E_0(N_0) - \mu N_0 + \mu N \simeq E_0(N) + \delta N(\mu - \mu_0(N_0)) = E_0(N), \tag{2.39}$$

car $\mu = \mu_0(N_0)$ d'après la définition (2.8). On obtient finalement l'expression suivante pour l'énergie de l'état fondamental à N atomes :

$$\begin{aligned} E_{\text{fond}}(N) \simeq N \sum_{\mathbf{r}} \ell^d \Bigg[-\frac{\hbar^2}{2m}\phi_0(\mathbf{r};N)\Delta\phi_0(\mathbf{r};N) + U(\mathbf{r})\phi_0^2(\mathbf{r};N) \\ + \frac{1}{2} g_0 (N-1)\phi_0^2(\mathbf{r};N) \Bigg] - \sum_s \epsilon_s \langle v_{s\perp}|v_{s\perp}\rangle, \end{aligned} \tag{2.40}$$

résultat identique à celui prédit par la théorie de Bogoliubov, voir l'équation (71) de [101].

2.2.3 Fonction de corrélation du second ordre

La fonction de corrélation du second ordre est définie par :

$$g_2(\mathbf{r}) \equiv \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{0})\hat{\psi}(\mathbf{0})\hat{\psi}(\mathbf{r})\rangle \tag{2.41}$$

De façon cohérente avec notre approche perturbative, nous allons calculer $g_2(\mathbf{r})$ au second ordre en $\epsilon_{1,2}$. Pour cela, on récrit son expression (2.41) en fonction de l'opérateur donnant la densité $\hat{\rho}$ et, ce faisant, le commutateur du champ atomique (1.8) apparaît. Puis, on développe $\hat{\rho}$ en fonction de ρ_0 et $\delta\hat{\rho}$ et on prend les valeurs moyennes dans H_2, voir l'équation (2.26), pour les termes quadratiques en $\delta\hat{\rho}$ et

dans $H_2 + H_3$, voir l'équation (2.27), pour les termes linéaires. Le résultat obtenu est le suivant :

$$g_2(\mathbf{r}) \simeq \rho_0(\mathbf{r})\rho_0(\mathbf{0}) + \rho_0(\mathbf{0})\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\rangle_3 + \rho_0(\mathbf{r})\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle_3 + \langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle_2 - \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{\ell^d}\rho_0(\mathbf{0}). \tag{2.42}$$

Cette dernière expression donne toutefois l'impression que notre prédiction dépend fortement de la taille du réseau ℓ et diverge même lorsque cette taille tend vers zéro. Cette dépendance est en fait exactement compensée par un terme équivalent qui apparaît systématiquement dans le calcul de $\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle_2$. Pour faire apparaître cette compensation dans le cas général, on écrit $\delta\hat{\rho}$ en fonction de l'opérateur $\hat{\Lambda}$ défini (2.29) précédemment :

$$\delta\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho_0(\mathbf{r})}\left(\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) + \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\right) + \hat{P}\partial_{N_0}\rho_0(\mathbf{r}; N_0), \tag{2.43}$$

et on introduit la notation : : comme désignant le produit des opérateurs $\hat{\Lambda}$ et $\hat{\Lambda}^\dagger$ dans l'ordre normal. On peut ainsi récrire

$$\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0}) = :\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0}): + \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{\ell^d}\rho_0(\mathbf{0}) - N_0\phi_0^2(\mathbf{r})\phi_0^2(\mathbf{0}), \tag{2.44}$$

à l'aide des relations de commutation sur $\hat{\Lambda}$, et on obtient finalement l'expression

$$g_2(\mathbf{r}) = (1 - 1/N)\,\rho(\mathbf{0})\rho(\mathbf{r}) + \langle:\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0}):\rangle_2, \tag{2.45}$$

dont la dépendance en $1/\ell^d$ a disparu et où $\rho = \rho_0 + \langle\delta\hat{\rho}\rangle_3$ désigne la densité moyenne calculée à l'ordre 2 en $\epsilon_{1,2}$. Encore une fois, on retrouve une prédiction identique à la théorie de Bogoliubov.

2.2.4 Fonction de corrélation du premier ordre

On en vient au calcul de la fonction de corrélation du premier ordre [5] , définie par :

$$g_1(\mathbf{r}) \equiv \langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{0})\rangle = \langle\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}e^{i(\hat{\theta}(\mathbf{0})-\hat{\theta}(\mathbf{r}))}\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{0})}\rangle. \tag{2.46}$$

Pour calculer g_1, on procède comme on l'a déjà fait dans les paragraphes précédents. On développe l'opérateur donnant la densité à l'ordre 2 en $\epsilon_{1,2}$ puis on prend les valeurs moyennes dans H_2, voir l'équation (2.26), pour les termes quadratiques en $\delta\hat{\rho}$ et $\hat{\theta}$ et dans $H_2 + H_3$, voir l'équation (2.27), pour les termes linéaires en $\delta\hat{\rho}$ et $\hat{\theta}$.

Pour le détail des calculs, on se reportera à la **publication II**. L'**encadré 3** explique comment on utilise le théorème de Wick pour calculer certaines valeurs moyennes dans H_2.

[5] appelée aussi matrice densité à un corps.

Encadré 3 : Utilisation du théorème de Wick

Le théorème de Wick permet de calculer des valeurs moyennes de produits d'opérateurs dans le cas particulier où l'opérateur densité est gaussien :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\, e^{-\sum_\alpha \nu_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha}. \tag{B3-1}$$

On suppose que les opérateurs $\hat{b}_i$ sont des combinaisons linéaires des opérateurs $\hat{a}_\alpha$ et $\hat{a}_\alpha^\dagger$. Le théorème de Wick donne alors la relation suivante :

$$\langle b_1 b_2 \dots b_{2n}\rangle = \sum_{\mathcal{P}} \prod_{(i,j)\in\mathcal{P}} \langle b_i b_j\rangle. \tag{B3-2}$$

Dans cette expression, on somme sur tous les regroupements possibles des b_i par couples (cette opération est désignée par $\mathcal{P}$) et on fait le produit sur l'ensemble des couples ainsi formés.

Application du théorème dans notre approche

H_2 étant quadratique (2.25) dans les opérateurs $\hat{b}_s$ et $\hat{b}_s^\dagger$, on peut appliquer le théorème de Wick pour le calcul de valeurs moyennes dans H_2. On suppose que A est une combinaison linéaire des opérateurs $\hat{b}_s$ (comme c'est le cas pour $\hat{\theta}$ ou $\delta\hat{\rho}$ par exemple) et on montre que

$$\langle e^{iA}\rangle_2 = e^{-\langle A^2\rangle_2/2}. \tag{B3-3}$$

Pour cela, on développe $\exp(iA)$ en $\sum_n i^n A^n/n!$ et on note que seules les valeurs paires de n contribuent au résultat. L'application du théorème de Wick donne :

$$\langle A^{2n}\rangle_2 = (2n-1)(2n-3)(2n-5)\dots 1\ \left(\langle A^2\rangle_2\right)^n = \frac{(2n)!}{2^n n!}\ \left(\langle A^2\rangle_2\right)^n. \tag{B3-4}$$

Il reste à resommer les différents termes :

$$\sum_n \frac{(-1)^n}{(2n)!}\ \frac{(2n)!}{2^n n!}\ \left(\langle A^2\rangle_2\right)^n = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{\langle A^2\rangle_2}{2}\right)^n = e^{-\langle A^2\rangle_2/2}, \tag{B3-5}$$

ce qui démontre la formule (B3-3). De la même façon, on peut montrer que

$$\langle B\, e^{iA}\rangle_2 = i\langle BA\rangle_2 e^{-\langle A^2\rangle_2/2}, \tag{B3-6}$$

où B est une combinaison linéaire des opérateurs $\hat{b}_s$. Dans ce cas, seules les valeurs impaires de n contribuent au calcul. L'application du théorème de Wick donne :

$$\langle BA^{2n+1}\rangle_2 = (2n+1)(2n-1)\dots 1\ \langle BA\rangle_2\ \left(\langle A^2\rangle_2\right)^n = \langle BA\rangle_2\ \frac{(2n+1)!}{2^n n!}\ \left(\langle A^2\rangle_2\right)^n \tag{B3-7}$$

et conduit à la formule (B3-6) après la resommation :

$$\sum_n \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\ \frac{(2n+1)!}{2^n n!}\ \left(\langle A^2\rangle_2\right)^n = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{\langle A^2\rangle_2}{2}\right)^n = e^{-\langle A^2\rangle_2/2}. \tag{B3-8}$$

L'expression finale obtenue pour $g_1(\mathbf{r})$ peut s'écrire sous cette forme :

$$g_1(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{0})}\exp\left[-\frac{1}{2}\langle :(\Delta\theta)^2: \rangle_2 - \frac{1}{8}\langle :(\Delta\delta\tilde{\rho})^2: \rangle_2\right], \tag{2.47}$$

valable uniquement à l'ordre 2 en $\epsilon_{1,2}$. $\rho = \rho_0 + \langle\delta\hat{\rho}\rangle_3$ désigne la densité moyenne, : : l'ordre normal par rapport aux opérateur $\hat{\Lambda}$ et $\hat{\Lambda}^\dagger$ et on a posé :

$$\Delta\theta \equiv \hat{\theta}(\mathbf{0}) - \hat{\theta}(\mathbf{r}) \tag{2.48}$$

$$\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})}{\rho_0(\mathbf{r})}. \tag{2.49}$$

Le premier terme dans l'exponentielle correspond aux fluctuations de phase qui sont quelconques dans notre approche. Ces fluctuations conduisent notamment pour les systèmes de basse dimension à une décroissance de g_1 à longue distance. Le second terme dans l'exponentielle correspond aux fluctuations de densité qui sont petites dans notre approche. En particulier, on a pu l'insérer dans l'exponentielle ce qui se justifie pour notre calcul restreint à l'ordre 2 en $\epsilon_{1,2}$.

Lien avec la théorie de Bogoliubov

Contrairement aux trois sous-sections précédentes où nos prédictions pour les observables sont les mêmes que celles de la théorie de Bogoliubov, l'expression (2.47) de g_1 donne un résultat différent de ce que prédirait la théorie de Bogoliubov. En effet, on s'intéresse à un régime où les fluctuations de densité sont petites mais où les fluctuations de phase sont importantes. Les observables à deux corps, comme le potentiel chimique, l'énergie du fondamental ou la fonction g_2 sont physiquement reliées aux fluctuations de densité et ne dépendent donc pas de la présence d'un condensat de Bose-Einstein.

Au contraire, le comportement de g_1 à grande distance (ou l'ordre à longue portée) est fortement modifié si les fluctuations de phase deviennent importantes comme c'est le cas pour les quasicondensats. La présence d'un vrai condensat de Bose-Einstein s'accompagne de faibles fluctuations de phase. Dans ce dernier cas, on peut développer l'exponentielle dans l'expression (2.47) de $g_1(\mathbf{r})$. On remplace ensuite $\Delta\theta$ et $\Delta\tilde{\rho}$ par leurs expressions en fonction des opérateurs $\hat{\Lambda}$ et $\hat{P}$. Si on se place dans l'ensemble canonique, on enlève les termes en $\hat{P}$ qui viennent des fluctuations grand canonique du nombre de particules du gaz. Après calcul et utilisation de l'équation (2.28), on reobtient exactement les résultats de la théorie de Bogoliubov pour la fonction g_1, c'est-à-dire :

$$g_1^{\mathrm{Bog}}(\mathbf{r}) = \Psi_c(\mathbf{r})\Psi_c(\mathbf{0}) + \langle\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{0})\rangle, \tag{2.50}$$

où $\Psi_c(\mathbf{r}) = \sqrt{N_0}\,\phi_0(\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{r})/\sqrt{N_0}$ est le champ du condensat à l'ordre 2 en $\epsilon_{1,2}$.

On peut aussi, à partir de cette dernière expression, exprimer la fonction g_1 dans le cas général d'un quasicondensat en fonction de ce que prédirait la théorie de Bogoliubov. On obtient :

$$g_1(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{0})}\exp\left[\frac{g_1^{\mathrm{Bog}}(\mathbf{r})}{\sqrt{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{0})}} - 1\right]. \tag{2.51}$$

valable encore une fois uniquement à l'ordre 2 en $\epsilon_{1,2}$. Cette formule est néanmoins très puissante. Elle permet de calculer g_1 pour un quasicondensat comme s'il y avait un condensat de Bose-Einstein. Qui plus est, elle permet de passer continûment d'un condensat à un quasicondensat en gardant la même formule pour g_1.

2.3 Application au gaz homogène

Les prédictions d'observables que nous avons obtenues sont très générales mais restent assez formelles et ne permettent pas de discussion physique détaillée. Dans un premier temps, l'application du formalisme au cas simple du gaz homogène est un bon moyen d'obtenir des résultats plus directement interprétables physiquement ainsi que des expressions analytiques relativement légères. Par ailleurs, la plupart des prédictions antérieures de la littérature concernent le gaz homogène [6] ce qui va faciliter la comparaison avec nos résultats.

Pour étendre nos résultats au cas plus complexe d'un gaz inhomogène, par exemple un gaz dans un piège harmonique, il est souvent possible d'utiliser l'approximation de densité locale qui suppose que le gaz se comporte localement comme un gaz homogène, la densité du gaz pouvant elle varier d'un point à l'autre du système. Pour ce faire, on remplace dans les expressions d'observables du gaz homogène, la densité constante ρ par la densité variable $\rho(\mathbf{r})$. L'approximation de densité variable est valable si la densité $\rho_0(\mathbf{r})$ varie lentement par rapport aux longueurs caractéristiques du gaz homogène et si l'observable considérée ne fait pas intervenir des régions spatialement trop éloignées.

Nous allons donc dans cette section calculer plus explicitement les observables de la section précédente pour un gaz homogène dont la densité est constante spatialement. Dans ce cas, la solution de l'équation de Gross-Pitaevskii est trivialement $\rho_0 = N_0/L^d$ (L désigne la taille du système) avec $\mu = g_0\,\rho_0$.

Les équations de Bogoliubov sont aussi aisément résolues, les modes étant de la forme $u_k(r) = \bar{u_k}\, e^{ikr}/L^{d/2}$ et $v_k(r) = \bar{v_k}\, e^{ikr}/L^{d/2}$ avec

$$\bar{u_k} \pm \bar{v_k} = \Big[\frac{\hbar^2k^2/2m + 2\mu}{\hbar^2k^2/2m}\Big]^{\mp 1/4}, \tag{2.52}$$

et d'énergies propres

$$\epsilon_k = \left[\frac{\hbar^2k^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + 2\mu\right)\right]^{1/2}. \tag{2.53}$$

2.3.1 Équation d'état

L'expression générale du potentiel chimique (2.36) donne pour le gaz homogène :

$$\mu = \rho g_0 + g_0 \int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}[(\bar{u}_k + \bar{v}_k)^2 n_k + \bar{v}_k(\bar{u}_k + \bar{v}_k)], \tag{2.54}$$

[6] ceci car, pendant longtemps, le système physique expérimental de référence fut l'hélium 4.

où $n_k = 1/(\exp(\beta\epsilon_k)-1)$ est le facteur d'occupation de Bose. $\mathcal{D} = [-\pi/\ell, \pi/\ell]^d$ est le domaine d'intégration correspondant à notre modèle sur réseau. Cette formule est valable à 1D, 2D et 3D et ne comporte pas de divergence infrarouge (c'est-à-dire pour $\mathbf{k} \to 0$). Cependant, le comportement à grand vecteur d'onde de cette expression, qui est donné par

$$\bar{v}_k(\bar{u}_k + \bar{v}_k) \simeq -\frac{m\mu}{\hbar^2 k^2}, \tag{2.55}$$

est convergent à 1D, mais divergent à 2D et 3D lorsque la taille du réseau $\ell \to 0$. Cette apparente dépendance en la coupure $\hbar^2/m\ell^2$ est en fait exactement compensée par la dépendance de la constante de couplage effective g_0 en la taille du réseau ℓ. En incluant cette dépendance, nous allons montrer que l'expression du potentiel chimique est finie à 2D et 3D et évidemment à 1D, lorsque la taille du réseau $\ell \to 0$.

Concentrons nous tout d'abord sur le cas 1D à température nulle. Comme l'intégrale apparaissant dans l'équation (2.54) est convergente à grand k, on peut étendre l'intégration sur k de $-\infty$ à $+\infty$ en ajoutant puis en soustrayant le terme $2g_0 \int_{\pi/\ell}^{+\infty} (dk/\pi)\bar{v}_k(\bar{u}_k + \bar{v}_k)$. On peut estimer la contribution de ce terme à partir de (2.55). On obtient $-m\ell g_0\mu/(\pi^2\hbar^2)$ ce qui, soustrait à ρg_0, donne simplement ρg si on utilise l'équation (1.31) et qu'on se restreint au deuxième ordre en $\epsilon_{1,2}$. On peut finalement récrire (2.54) sous la forme :

$$\mu = \rho g + g \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \left[\bar{v}_k(\bar{u}_k + \bar{v}_k)\right] \tag{2.56}$$

qu'on calcule à partir des expressions (2.52) afin d'obtenir :

$$\mu = g\rho\left(1 - \frac{1}{\pi\rho\,\xi}\right). \tag{2.57}$$

On retrouve la prédiction de Lieb et Liniger dans la limite d'interactions faibles [116].

A 2D, on rappelle que le lien entre la constante de couplage effective g_0 et la longueur de diffusion 2D, notée a, est donnée par l'équation (1.35). Par ailleurs, on peut calculer l'intégrale sur $\mathcal{D}$ de $\bar{v}_k(\bar{u}_k + \bar{v}_k)$ en utilisant la même méthode que dans la sous-section 1.3.2. On obtient

$$-\int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \bar{v_k}(\bar{u_k} + \bar{v_k}) \simeq \frac{m\mu}{4\pi\hbar^2}\left[\ln\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{m\ell^2\mu}\right) - 1 - \frac{4G}{\pi} + 2\ln 2\right]. \tag{2.58}$$

Le remplacement de g_0 dans (2.54) par son expression (1.28) conduit finalement à l'équation d'état :

$$\rho = \frac{m\mu}{4\pi\hbar^2} \ln\left(\frac{4\hbar^2}{a^2 m\mu e^{2C+1}}\right) - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} (\bar{u_k} + \bar{v_k})^2 n_k. \tag{2.59}$$

Cette équation implicite est identique au résultat obtenu par Popov par sa méthode d'intégration fonctionnelle [102]. La dépendance en ℓ a disparu et l'intégrale

sur $\mathbf{k}$ est bien convergente à grand vecteur d'onde. A température nulle, on peut inverser l'équation (2.59) si l'on néglige les corrections en $\ln(\ln(1/\rho a^2))$ par rapport à $\ln(1/\rho a^2)$. On obtient alors

$$\mu \simeq \frac{4\pi\hbar^2\rho}{m\ln(1/\rho a^2)} \tag{2.60}$$

ce qui correspond au résultat de Schick [131] ainsi qu'à celui de Fisher et Hohenberg [132] obtenu de façon plus heuristique.

A 3D, le lien entre la constante de couplage effective g_0 et la constante $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ est donné par (1.39) qui peut aussi s'écrire sous la forme :

$$g_0 = \frac{g}{1 - g\displaystyle\int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\hbar^2k^2/m}}. \tag{2.61}$$

On remplace ainsi g_0 dans (2.54) par cette expression ce qui conduit à l'équation d'état :

$$\mu = \rho\, g + g_0 \int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left((\bar{u}_k + \bar{v}_k)^2 n_k + \bar{v}_k(\bar{u}_k + \bar{v}_k) + \frac{m\mu}{\hbar^2k^2}\right) \tag{2.62}$$

Dans cette dernière expression, l'intégrale sur les vecteurs d'onde est convergente lorsque la taille du réseau $\ell \to 0$. A température nulle, on peut effectuer l'intégration et on obtient :

$$\mu = g\rho\left(1 + \frac{32\sqrt{\pi}}{3}\sqrt{\rho a^3}\right) \tag{2.63}$$

qui coïncide avec le résultat de Lee et Yang [133].

2.3.2 Fonction $g_1(\mathbf{r})$

La fonction de corrélation du premier ordre $g_1(\mathbf{r})$ se calcule directement à partir de la prédiction de la théorie de Bogoliubov. On obtient dans la limite thermodynamique :

$$\ln[g_1(\mathbf{r})/\rho] = \frac{g_1^{\mathrm{Bog}}(\mathbf{r})}{\rho} - 1 = -\frac{1}{\rho}\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\left[\left(\bar{u}_k^2 + \bar{v}_k^2\right) n_k + \bar{v}_k^2\right](1 - \cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}). \tag{2.64}$$

On a considéré dans cette expression la limite $\ell \to 0$ et la formule obtenue ne comporte ni divergence infrarouge, ni divergence ultraviolette et est valable à 1D, 2D et 3D.

Une analyse dimensionnelle rapide de l'équation (2.64) semble suggérer que le terme à droite du signe égal est d'ordre $1/\rho\xi^d$ ou $1/\rho\lambda^d$ et est donc petit dans les deux cas. Pour cela, on suppose que chacune des fonctions apparaissant dans l'intégrale est d'ordre unité et que l'échelle des vecteurs d'onde est $1/\xi$ ou $1/\lambda$. Cette analyse rapide est cependant fausse à 1D ou 2D. Le comportement de la fonction $\left(\bar{u}_k^2 + \bar{v}_k^2\right) n_k + \bar{v}_k^2$ est en effet singulier lorsque $\mathbf{k} \to 0$, en $1/k^2$ à température non nulle et en $1/k$ à température nulle. Cette divergence infrarouge

est compensée dans l'intégrale par le terme en $(1-\cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ si bien que l'intégrale de l'équation (2.64) est bien définie lorsque $\mathbf{k}\to 0$ quelque soit la dimension d.

A 3D à toute température et à 2D pour $T=0$, le terme k^{d-1} de l'élément d'intégration est suffisant pour compenser la divergence infrarouge de $\left(\bar{u}_k^2+\bar{v}_k^2\right)n_k+\bar{v}_k^2$ et les conclusions de l'analyse dimensionnelle sont alors correctes, c'est-à-dire que (2.64) est petit devant 1. On retrouve qu'il y a un ordre à longue portée et donc un condensat de Bose-Einstein.

A 1D à toute température et à 2D pour $T\neq 0$, les conclusions sont différentes. En effet, le terme en $(1-\cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ ne compense la divergence infrarouge que pour $k<1/|\mathbf{r}|$, c'est-à-dire pour de très petits vecteurs d'onde lorsque $|\mathbf{r}|\to+\infty$. Au-delà de ce vecteur d'onde limite, la singularité à petit vecteur d'onde de $\left(\bar{u}_k^2+\bar{v}_k^2\right)n_k+\bar{v}_k^2$ joue un rôle et donne des contributions importantes à $\ln(g_1/\rho)$.

En particulier, à 2D pour $T\neq 0$ et à 1D pour $T=0$, on trouve que la contribution à $\ln(g_1/\rho)$ est proportionnelle à

$$\int\frac{dk}{k}(1-\cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\longrightarrow\frac{\mathbf{1}}{\rho\xi}\ln(\mathbf{r}/\xi) \tag{2.65}$$

pour r grand, ce qui correspond à une décroissance en loi de puissance pour $g_1(r)$ (pour plus de précisions sur les systèmes homogènes 2D, voir [89, 102, 103, 134]).

A 1D et $T\neq 0$, la contribution à $\ln(g_1/\rho)$ est de l'ordre de

$$\int\frac{dk}{k^2}(1-\cos kr)\longrightarrow\frac{r}{\ell_c} \tag{2.66}$$

pour r grand, où $\ell_c=\rho\lambda^2/\pi$ est la longueur de cohérence du champ atomique. La décroissance de $g_1(r)$ est exponentielle comme dans le cas d'un gaz parfait dégénéré à 1D.

On a donc pu caractériser, selon la dimension d'espace et la température, le comportement de la fonction $g_1(r)$ à grande distance. ce qui permet notamment de conclure sur l'existence ou non d'un condensat de Bose-Einstein. Physiquement, on constate que ce sont les excitations aux grandes longueurs d'onde qui donnent des fortes fluctuations de phase et peuvent ainsi potentiellement détruire le condensat. Ces excitations de basse énergie sont de plus en plus dominées par les excitations de plus haute énergie à mesure que la dimension de l'espace augmente, si bien que le condensat se stabilise.

2.3.3 Calcul plus complet à 1D

Nous allons maintenant aborder de façon plus précise le cas de g_1 à 1D afin de comparer nos prédictions aux résultats existant dans la littérature. A température nulle, on peut, à partir des expressions (2.64), (2.52) et (2.53) déterminer la limite asymptotique de $g_1(r)$ lorsque $r\gg\xi$. On trouve (voir annexe A)

$$g_1(r)\simeq\rho\left(\frac{r_1}{r}\right)^{1/2\pi\rho\,\xi}, \tag{2.67}$$

avec $r_1 = e^{2-C}\,\xi/4 \simeq 1.037\,\xi$, en accord avec Popov [135]. A température finie, le logarithme de g_1/ρ est une intégrale de la forme

$$-\int_0^{+\infty} \frac{A(k)}{k^2}[1-\cos(kr)] \tag{2.68}$$

où $A(k)$ est une fonction régulière et paire en k (voir A.3) et dont le comportement est quadratique en k autour de $k=0$. En particulier, $A(0) = mk_BT/\pi\hbar^2\rho = 2/\rho\lambda^2$. On écrit $A(k)$ comme $[A(k)-A(0)]+A(0)$ et on sépare l'intégrale (2.68) en deux. Le premier terme, lorsque $r \to +\infty$, tend vers une constante K donnée par

$$K = \int_0^{+\infty} \frac{A(k)-A(0)}{k^2}. \tag{2.69}$$

Le second terme peut se calculer exactement. On obtient :

$$A(0)\int_0^{\infty} \frac{dk}{k^2}[1-\cos(kr)] = \frac{r}{\ell_c}, \tag{2.70}$$

où $\ell_c = \rho\lambda^2/\pi$ est la longueur de cohérence 1D. En conclusion, lorsque $r \to +\infty$, on obtient le développement asymptotique :

$$-\ln[g_1(r)/\rho] = \frac{r}{\ell_c} + K + o(1/r^n), \tag{2.71}$$

où l'on peut montrer par intégrations par partie successives que le dernier terme de cette expression tend vers zéro plus vite que toute loi de puissance, contrairement au résultat de [134]. Le comportement obtenu (2.71) est donc une décroissance exponentielle de longueur caractéristique ℓ_c [89, 102, 134]. Ce résultat coïncide notamment avec la limite de faibles fluctuations de densité de l'approche en champ classique à 1D [104].

On a ainsi montré que la formule (2.64) redonne les comportements asymptotiques à grande distance de $g_1(\mathbf{r})$. Mais ce n'est pas tout, cette formule appliquée à 1D donne en fait $g_1(r)$ pour toute distance r. En effet, la plus petite des échelles typiques de variation de $g_1(r)$ est ξ et notre approche nous donne accès aux valeurs de $g_1(r)$ pour des distances r plus petites que ξ. Ce n'est pas le cas des approches qui ne traitent pas correctement les modes d'énergie supérieure au potentiel chimique μ, comme les approches décrivant le gaz comme un liquide de Luttinger et où seuls les modes de basse énergie [7] sont accessibles [136]. On calcule ainsi figure 2.1 le logarithme de g_1 en fonction de r/ξ pour différentes températures.

En particulier, cette connaissance complète de $g_1(r)$ permet le calcul de la distribution en impulsions des atomes :

$$\Pi(p) = 2\int_0^{+\infty} dr\, g_1(r)\cos(pr/\hbar). \tag{2.72}$$

La normalisation de cette distribution est donnée par $\int dp\Pi(p) = 2\pi\hbar\rho$ de telle sorte que $\Pi(p)$ est sans dimension. Figure 2.2, on représente la distribution en impulsions pour différentes températures et pour $\rho\xi = 10$.

[7] dans les approches de liquides de Luttinger, seule la partie linéaire du spectre de Bogoliubov, correspondant à des énergies plus petites que le potentiel chimique, apparaît dans le formalisme.

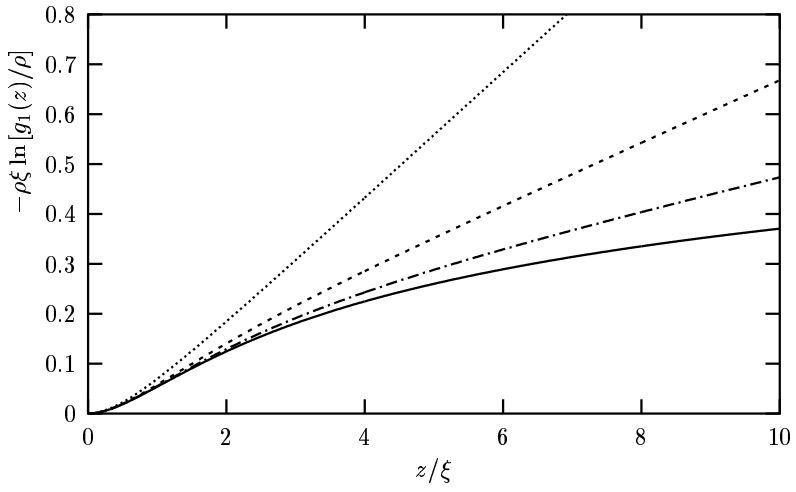


FIG. 2.1: Fonction de corrélation du premier ordre $g_1(z)$ pour un gaz de bosons 1D homogène et pour des interactions répulsives. Le calcul est effectué dans la limite thermodynamique. Les différentes courbes correspondent à différentes températures comparées au potentiel chimique : $k_BT/\mu = 0$ (ligne pleine), 1/15 (ligne point-pointillés), 1/8 (ligne pointillés), 1/4 (ligne de points). Sur cette figure, on voit apparaître à grande distance un comportement logarithmique à température nulle et un comportement linéaire à température non nulle.

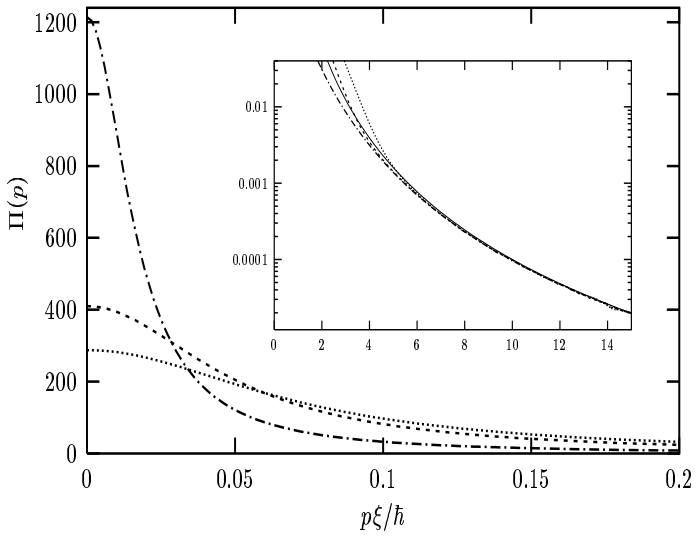


FIG. 2.2: Distribution en impulsions d'un gaz de Bose 1D répulsif dans la limite thermodynamique. On trace $\Pi(p)$ pour différentes températures : $k_BT/\mu = 1/3$ (ligne point-pointillés), 1 (ligne de pointillés), 10/7 (ligne de points). On a pris ici $\rho\xi = 10 \gg 1$. La ligne pleine représente la limite à grand moment $(\hbar/p\xi)^4$.

En intégrant par partie l'expression donnant la distribution en impulsion, on montre dans l'annexe A que le comportement à grand p de $\Pi(p)$ est relié à la dérivée troisième de g_1 en $r = 0^+$ qui est non nulle. Ainsi, on obtient, lorsque $p \to +\infty$:

$$\Pi(p) = \frac{2\hbar^4 g_1^{(3)}(0^+)}{p^4} + o(1/p^4) \quad \text{avec} \quad g_1^{(3)}(0^+) = \mu^2 m^2/(2\hbar^4). \tag{2.73}$$

Cette prédiction, valable à toute température, coïncide avec le résultat d'un calcul exact basé sur l'ansatz de Bethe qui a été dérivé récemment pour le même système [137].

En conclusion, l'approche que nous avons développée permet de déterminer g_1 en tout point r de l'espace. On réobtient ainsi les comportements asymptotiques exacts à grande distance de g_1 mais aussi et surtout le comportement à petite distance de g_1. En particulier, on constate que notre prédiction de la dérivée troisième de g_1 en $r = 0^+$ est exacte dans la limite d'interaction faible.

2.3.4 Comportements asymptotiques

On revient dans ce paragraphe sur la constante K définie en (2.69) et apparaissant dans la limite asymptotique à température finie de $g_1(r)$ lorsque $r \to +\infty$. On montre dans l'appendice A que K peut s'écrire sous la forme :

$$K = \frac{1}{\pi\rho\xi}\mathcal{I}\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) \tag{2.74}$$

où $\mathcal{I}(\mu/k_B T)$ est une fonction, représentée figure (2.3), qui ne dépend que du rapport $\mu/k_B T$. La forme de la constante K est l'occasion de revenir plus en détail sur les comportements asymptotiques de la fonction $g_1(r)$ à 1D. On constate dans l'expression (2.64) qu'il y a deux types de contributions au calcul de $g_1(r)$, l'une thermique proportionnelle à n_k et l'autre purement quantique qui est la seule présente lorsque la température est nulle. On retrouve ces deux contributions dans l'expression (1.11) de $A(k)$. Nous allons distinguer deux cas, selon que le potentiel chimique est plus grand ou moins grand que l'énergie thermique.

Dans le premier cas, $\mu < k_B T$, la contribution thermique est toujours dominante. L'échelle de longueur sur laquelle $g_1(r)$ atteint son régime asymptotique (2.71) est ξ, c'est-à-dire que (2.71) est valable pour $r \gg \xi$. La figure 2.3 donne la fausse impression que K diverge lorsque $k_B T \gg \mu$. En effet, si on se restreint à l'ordre dominant pour $\mathcal{I}(x)$ qui est $\pi/(4x)$, on obtient :

$$K \simeq \frac{1}{4\rho\xi}\frac{k_B T}{\mu} = \frac{\xi}{2\ell_c} \tag{2.75}$$

qui est petit car d'ordre ϵ_1^2 d'après (1.46). K est donc du même ordre que les fluctuations de densité qui sont forcément petites dans notre approche.

Dans le second cas, $\mu > k_B T$ et on a deux échelles de longueur qui interviennent : ξ et λ^2/ξ. Pour $r < \xi$, on ne peut pas écrire de formule asymptotique pour $g_1(r)$ mais on montre que la partie quantique domine la partie thermique.

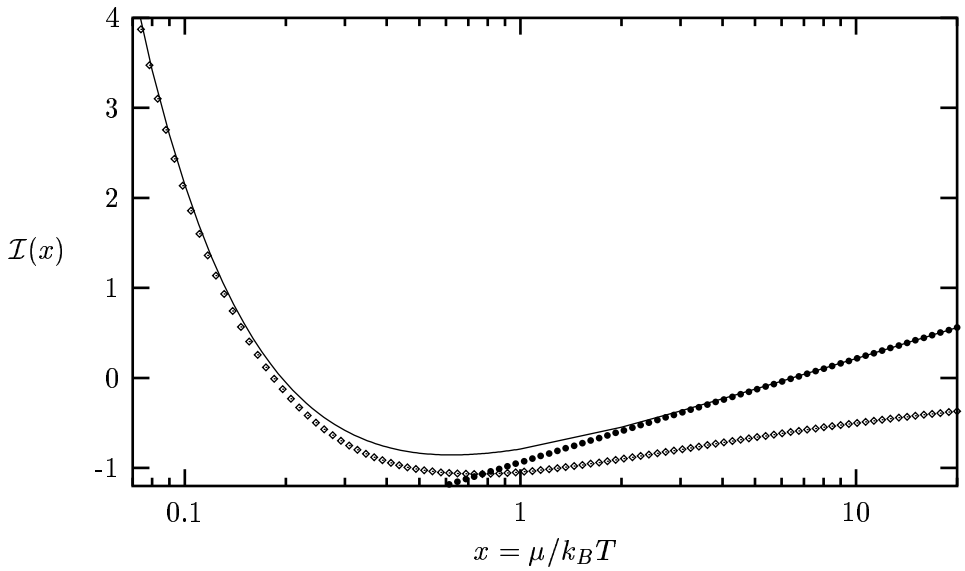


FIG. 2.3: La ligne en trait plein représente la fonction $\mathcal{I}(x)$ en fonction de $x = \mu/k_BT$. Les losanges blancs correspondent à la limite asymptotique aux petits x : $-1.8303/\sqrt{x} + \pi/(4x)$; les cercles noirs à la limite des grands x : $-0.9372 + (\ln x)/2$.

Pour $\xi < r < \lambda^2/\xi$, la partie purement quantique domine la partie thermique si bien que $g_1(r)$ suit la forme asymptotique à température nulle donnée par (2.67). Pour $r > \lambda^2/\xi$, la partie thermique devient non négligeable et on tend vers la formule asymptotique à température non nulle donnée par (2.71).

Il y a donc un domaine, pour $r < \lambda^2/\xi$, où on ne peut pas distinguer le comportement de la fonction $g_1(r)$ de ce qu'il serait si la température était nulle. Pour $r = \lambda^2/\xi$, la limite entre les deux comportements asymptotiques, la forme (2.67) donne (à l'ordre dominant en $x = \mu/(k_BT)$) :

$$-\ln[g_1(r)/\rho] = \frac{1}{2\pi\rho\xi}\ln\left(\frac{\lambda^2/\xi}{r_1}\right) \simeq \frac{1}{2\pi\rho\xi}\ln\left(\frac{\mu}{k_BT}\right) \tag{2.76}$$

et la forme (2.71) :

$$-\ln[g_1(r)/\rho] = \frac{\pi\lambda^2/\xi}{\rho\lambda^2} + \frac{1}{2\pi\rho\xi}\ln\left(\frac{\mu}{k_BT}\right) \simeq \frac{1}{2\pi\rho\xi}\ln\left(\frac{\mu}{k_BT}\right), \tag{2.77}$$

c'est-à-dire le même résultat.

2.4 Conclusion

Nous avons exposé dans ce chapitre notre méthode de résolution perturbative de l'hamiltonien modèle décrivant le gaz de bosons sur un réseau discret. Cette méthode est une généralisation en point de vue densité-phase de l'approche de Bogoliubov dont le domaine d'application est ainsi étendu aux quasicondensats. Elle permet en principe de calculer le développement de n'importe quelle observable en fonction des petits paramètres du problème. Les deux petits paramètres

de l'approche sont les fluctuations relatives de densité du quasicondensat ainsi que la différence de phase entre deux boîtes voisines. On a montré de façon explicite comment effectuer le calcul dans notre approche de l'équation d'état du gaz, de l'énergie de l'état fondamental ainsi que des fonctions de corrélation du 1^{er} et du 2^{e} ordre. A part pour le calcul de la fonction de corrélation du 1^{er} ordre, on retrouve les résultats de la théorie de Bogoliubov. La coïncidence avec la théorie de Bogoliubov est même complète lorsqu'un condensat est présent et que les fluctuations de phase sont petites. Finalement, nos résultats sont valables à 1D, 2D, 3D et ne comportent ni divergence infrarouge, ni divergence ultraviolette lorsque la taille du réseau tend vers zéro.

Nous avons appliqué le formalisme aux calculs des propriétés des gaz de Bose homogènes 1D, 2D et 3D. Nos résultats coïncident alors avec de nombreuses prédictions de la littérature. On a détaillé plus particulièrement le calcul de la fonction de corrélation du 1^{er} ordre à 1D. On montre qu'on peut déterminer celle-ci complètement, c'est-à-dire aussi bien son comportement à longue distance que son comportement à courte distance.

Conclusions et perspectives

Dans cette partie de la thèse, nous avons étendu la théorie de Bogoliubov à l'étude des gaz de Bose dilués de basse dimension. Ces gaz sont en interaction faible, fortement dégénérés et possèdent des faibles fluctuations de densité : c'est le régime des quasicondensats pour lequel la phase du champ atomique a une longueur de cohérence qui peut être finie. Lorsque cette longueur de cohérence devient plus grande que la taille du système, le quasicondensat redonne un condensat.

Plutôt que de considérer le cas d'un espace continu nous avons discrétisé l'espace ce qui est un moyen commode de contourner les difficultés liées à la définition d'un opérateur donnant la phase. On a ensuite effectué un développement perturbatif de l'hamiltonien qui doit nous permettre *a priori* de calculer les observables à tous les ordres de l'interaction. Nos résultats sont valables à 1D, 2D et 3D et ne comportent pas de divergence lorsque la taille du réseau tend vers zéro. Finalement notre approche coïncide exactement avec l'approche de Bogoliubov quand un condensat est présent.

On a ainsi construit un cadre général à partir duquel on peut décrire de nombreuses expériences sur les quasicondensats. Une application simple et directe consisterait à étudier l'expérience du laser à atomes [104] dans laquelle un gaz de bosons est piégé transversalement mais reste libre dans la direction longitudinale.

Les améliorations que l'on peut apporter à notre approche sont très nombreuses. Tout d'abord, on peut penser à étendre son régime d'application à des températures plus élevées tout en restant suffisamment loin de la température de dégénérescence quantique. On peut s'inspirer pour cela des extensions à température finie de la théorie de Bogoliubov dues à Beliaev [138] ou à d'autres.

On n'a pas pris en compte dans notre approche les excitations de type vortex qui peuvent être importantes notamment à 2D où l'on sait que ce sont les paires de vortex-antivortex qui sont à l'origine de la transition de Kosterlitz-Thouless. Un vortex correspond à une circulation non nulle de la phase, c'est-à-dire que sa présence est liée à la définition *modulo* 2π de la phase. Or cette propriété n'est pas présente dans notre traitement même s'il semble que l'effet des paires de vortex-antivortex soit négligeable à très basse température [102].

Pour un gaz piégé en rotation suffisamment rapide, il peut y avoir apparition de vortex dans le condensat ou dans le quasicondensat si la géométrie du piège est assez anisotrope. Ce ou ces vortex introduisent des nouveaux modes de basse énergie qui vont modifier les propriétés de cohérence de la phase du champ atomique. L'influence des vortex sur la physique des quasicondensats est ainsi une autre extension possible et intéressante de notre approche.

Pour finir, on peut évoquer l'équivalent du quasicondensat dans les gaz fermioniques que l'on peut appeler par extension le quasicondensat BCS. La vision simplifiée du condensat BCS est celle d'un condensat de Bose de paires de Cooper, chaque paire de Cooper étant un état lié formé par deux fermions dans des états hyperfins différents. Le paramètre d'ordre $\Delta(\mathbf{r})$ qui décrit le condensat est cohérent dans la théorie BCS. Pour des systèmes de basse dimension, on s'attend à ce que les fluctuations de la phase du paramètre d'ordre soient telles que la longueur de cohérence de cette phase soit finie. C'est par conséquent une perspective intéressante que de vouloir étudier la décohérence de la phase du paramètre d'ordre en s'inspirant de notre approche pour les quasicondensats de bosons.

Annexe A

Développements asymptotiques de $g_1(r)$ à 1D

Dans cet appendice, on détaille trois calculs analytiques donnant les comportements asymptotiques de $g_1(r)$ à 1D pour un gaz de Bose répulsif dans la limite thermodynamique.

A.1 Limite à grand r pour $T = 0$

A température nulle, g_1 prend la forme suivante :

$$-\ln[g_1(\mathbf{r})/\rho] = \int_0^{+\infty} \frac{dk}{\pi\rho}\, \bar{v}_k^2\, (1-\cos k\, r). \tag{1.1}$$

où $\bar{v}_k$ se calcule à partir des expressions (2.52) :

$$\bar{v}_k^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\sqrt{k^2+4/\xi^2}} + \frac{\sqrt{k^2+4/\xi^2}}{k} - 2\right) \tag{1.2}$$

On pose le changement de variable $u = k\, r$ et on récrit le logarithme de g_1 :

$$-\ln[g_1(\mathbf{r})/\rho] = \frac{1}{2\pi\rho\, r}\int_0^{+\infty} du \left[\frac{u}{\sqrt{u^2+\kappa^2}} + \frac{\sqrt{u^2+\kappa^2}}{u} - 2\right]\sin^2(u/2) \tag{1.3}$$

avec $\kappa = 2r/\xi$. On s'intéresse au régime $r \gg \xi$, c'est-à-dire à la limite $\kappa \gg 1$. Dans l'intégrale sur u de l'expression (1.3), la fonction à l'intérieur des crochets varie lentement en fonction de u à l'échelle des oscillations de la fonction sinus. On va donc faire l'approximation $\sin^2(u/2) \simeq 1/2$ en prenant de soin de régulariser la fonction entre crochets en en extrayant la partie présentant une divergence infrarouge lorsque $u \to 0$ (en κ/u). On détermine ainsi la limite asymptotique, lorsque $\kappa \to +\infty$, de l'intégrale de l'expression (1.3) :

$$\frac{1}{2}\int_0^{+\infty} du \left[\frac{u}{\sqrt{u^2+\kappa^2}} + \frac{\sqrt{u^2+\kappa^2}}{u} - \frac{\kappa}{u}\theta(\kappa-u) - 2\right] + \int_0^{\kappa} du \frac{\kappa}{u}\sin^2(u/2) + o(1) \tag{1.4}$$

La première intégrale est bien définie et ne comporte pas de divergence lorsque $u \to 0$. Son intégration analytique donne :

$$\frac{1}{2}\int_0^{+\infty} du \left[\frac{u}{\sqrt{u^2+\kappa^2}} + \frac{\sqrt{u^2+\kappa^2}}{u} - \frac{\kappa}{u}\theta(\kappa-u) - 2\right] = \frac{\kappa}{2}(\ln 2 - 2) \qquad (1.5)$$

La deuxième intégrale est donnée par

$$\kappa\int_0^{\kappa} \frac{du}{u}\sin^2\left(\frac{u}{2}\right) = \frac{\kappa}{2}\ln\kappa - \frac{\kappa}{2}\mathrm{Ci}(\kappa) + \frac{\kappa C}{2} \qquad (1.6)$$

où C est la constante d'Euler et $\mathrm{Ci}(x) = -\int_x^{+\infty}\cos t/t = O(1/x)$ lorsque $x \to +\infty$. Ainsi, on peut négliger le terme en $\kappa\mathrm{Ci}(\kappa)$ et on obtient finalement :

$$-\ln[g_1(\mathbf{r})/\rho] \simeq \frac{1}{2\pi\rho}\frac{r}{\xi}(\ln(2r/\xi) + \ln 2 - 2 + C) = \frac{1}{2\pi\rho\,\xi}\ln\left(\frac{4r}{\xi e^{2-C}}\right) \qquad (1.7)$$

ce qui conduit immédiatement à (2.67) avec $r_1 = e^{2-C}\xi/4$.

A.2 Limite à grand p de $\Pi(p)$

Lorsque $p \to +\infty$, les oscillations du cosinus dans l'intégrale de (2.72) se font sur une échelle qui devient de plus en plus petite comparée aux variations typiques de $g_1(r)$ et $\Pi(p)$ tend par conséquent vers zéro.

Le lien entre la limite à grand p de $\Pi(p)$ et la dérivée troisième de g_1 en $r = 0^+$ se montre en intégrant (2.72) plusieurs fois par parties. Après 4 intégrations par partie, on obtient sans approximation :

$$\Pi(p) = \frac{2\hbar^4 g_1^{(3)}(0^+)}{p^4} + \frac{2\hbar^4}{p^4}\int_0^{+\infty} dr\, g_1^{(4)}(r)\cos(pr/\hbar). \qquad (1.8)$$

Les intégrations par partie du second terme de cette expression montrent qu'il décroît plus vite que le premier, qui donne donc le comportement asymptotique à grand p de $\Pi(p)$.

Calcul de $g_1^{(3)}(0^+)$

La fonction $g_1(r)$ est paire, comme on le voit dans l'équation (2.64), mais non analytique en $r = 0$. En effet, si on développe le $1 - \cos(kr)$ dans (2.64), on trouve une série de termes pairs en $k\,r$. Le comportement de $\bar{v}_k^2$ à grand vecteur d'onde est en $1/k^4$ si bien que les termes du développement de $1-\cos(kr)$ d'ordre supérieur à 2 en r ne sont pas intégrables à grand vecteur d'onde. On ne peut donc pas développer le $1 - \cos(kr)$ dans l'intégrale et la dérivée troisième de $g_1(r)$ en 0^+ n'est pas forcément nulle.

Toutefois, le terme en $\left(\bar{u}_k^2 + \bar{v}_k^2\right) n_k$ de l'intégrale (2.64) converge exponentiellement à grand vecteur d'onde si bien que la contribution à g_1 qui lui correspond

est analytique et possède en particulier une dérivée troisième nulle. On ne conserve donc dans le calcul que le terme en $\bar{v}_k^2$. On dérive trois fois et on obtient :

$$g_1^{(3)}(r) = \frac{1}{\xi^4} \int_0^{+\infty} \frac{du}{4\pi} u^3 \left(\frac{u}{\sqrt{u^2+4}} + \frac{\sqrt{u^2+4}}{u} - 2 \right) \sin(ur/\xi) \tag{1.9}$$

où on a posé $u = k\xi$. On coupe l'intégrale en $u = A \gg 1$. Le premier terme (pour $u < A$) est fini et tend vers zéro lorsque $r \to 0$. Pour le second terme ($u > A$), on tire partie du fait que $A \gg 1$ pour développer l'intégrant. On obtient :

$$g_1^{(3)}(r) \simeq \frac{1}{4\pi\xi^4} \int_{Ar/\xi}^{+\infty} \frac{4dy}{y} \sin y \underset{r\to 0}{\longrightarrow} \frac{1}{\pi\xi^4} \int_0^{+\infty} \frac{\sin y}{y}\, dy \tag{1.10}$$

où on a posé $y = ur/\xi$. En évaluant l'intégrale, on trouve $g_1^{(3)}(0^+) = 1/2\xi^4$, c'est-à-dire la formule (2.73) si l'on récrit ξ en fonction de μ.

A.3 Comportement limites de K

La fonction $A(k)$ introduite dans la sous-section 2.3.2 est donnée par :

$$\begin{aligned} A(k) = \frac{1}{2\pi\rho} \Bigg[& \left(\frac{k}{\sqrt{k^2+4/\xi^2}} + \frac{\sqrt{k^2+4/\xi^2}}{k} \right) k^2 n_k \\ & + \left(\frac{k}{\sqrt{k^2+4/\xi^2}} + \frac{\sqrt{k^2+4/\xi^2}}{k} - 2 \right) \frac{k^2}{2} \Bigg] \end{aligned} \tag{1.11}$$

si bien que le changement de variable $y = k\xi/2$ conduit à l'expression (2.74) avec

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(x) = \int_0^{+\infty} dy \Bigg[& \left(\frac{y}{\sqrt{y^2+1}} + \frac{\sqrt{y^2+1}}{y} \right) \frac{1}{e^{2xy\sqrt{y^2+1}} - 1} \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{y}{\sqrt{y^2+1}} + \frac{\sqrt{y^2+1}}{y} - 2 \right) - \frac{1}{2xy^2} \Bigg] \end{aligned} \tag{1.12}$$

où $x = \mu/k_B T$. On écrit $\mathcal{I}(x) = \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2(x)$ avec

$$\mathcal{I}_1 = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dy \left(\frac{y}{\sqrt{y^2+1}} + \frac{\sqrt{y^2+1}}{y} - 2 - \frac{1}{y(1+y)} \right) = -1 + \frac{\ln 2}{2} \tag{1.13}$$

et

$$\mathcal{I}_2(x) = \int_0^{+\infty} dy \left[\left(\frac{y}{\sqrt{y^2+1}} + \frac{\sqrt{y^2+1}}{y} \right) \frac{1}{e^{2xy\sqrt{y^2+1}} - 1} + \frac{1}{2y(1+y)} - \frac{1}{2xy^2} \right] \tag{1.14}$$

On va maintenant déterminer les deux développements asymptotiques de $\mathcal{I}_2(x)$ lorsque $x \to +\infty$ et lorsque $x \to 0$.

1. $x \to +\infty$

On peut montrer que la contribution provenant du terme en $y/\sqrt{y^2+1}$ entre parenthèses dans l'expression (1.14) est de l'ordre de $\mathcal{O}(1/x^2)$. Les contributions des autres termes s'écrivent sous la forme $\mathcal{I}_4(x) + \mathcal{I}_5(x)$ avec

$$\mathcal{I}_4(x) = \int_0^{+\infty} \frac{du}{2u} \left(\frac{1}{1+u/2x} - \frac{1}{1+u} \right) = \frac{1}{2} \ln 2x \tag{1.15}$$

et

$$\mathcal{I}_5(x) = \int_0^{+\infty} du \left(\frac{\sqrt{1+u^2/4x^2}}{u} \frac{1}{e^{u\sqrt{1+u^2/4x^2}} - 1} + \frac{1}{2u(1+u)} - \frac{1}{u^2} \right) \tag{1.16}$$

où l'on a posé le changement de variable $2xy = u$. On peut calculer cette dernière expression à l'ordre le plus bas en $1/x$ et on obtient, lorsque $x \to +\infty$:

$$\mathcal{I}_5(x) = \int_0^{+\infty} du \left(\frac{1}{u(e^u - 1)} + \frac{1}{2u(1+u)} - \frac{1}{u^2} \right) + o(1) \simeq -0.63033\ldots \tag{1.17}$$

Le développement asymptotique de $\mathcal{I}(x)$ lorsque $x \to +\infty$ est finalement donné par

$$\boxed{\mathcal{I}(x) = -0.9372\ldots + \frac{1}{2} \ln x + o(1)} \tag{1.18}$$

2. $x \to 0$

Le calcul est plus délicat. On considère tout d'abord la contribution provenant du terme en $y/\sqrt{y^2+1}$ entre parenthèses dans l'expression (1.14). On note $\mathcal{I}_3(x)$ cette contribution. Remarquons que le développement de la fonction $f(\alpha) = 1/(e^\alpha - 1)$ lorsque $\alpha \to 0$ est donné par $f(\alpha) = 1/\alpha - 1/2 + o(1)$. On va utiliser cette propriété en décomposant $\mathcal{I}_3(x)$ sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_3(x) = & \int_0^{+\infty} \frac{dy}{2x(1+y^2)} + \int_0^{+\infty} dy \left(\frac{1}{e^{2xy\sqrt{y^2+1}} - 1} - \frac{1}{2xy\sqrt{1+y^2}} \right) \\ & + \int_0^{+\infty} dy \left(\frac{y}{\sqrt{1+y^2}} - 1 \right) \left(\frac{1}{e^{2xy\sqrt{y^2+1}} - 1} - \frac{1}{2xy\sqrt{1+y^2}} \right). \end{aligned} \tag{1.19}$$

La première intégrale donne le comportement dominant, elle s'intègre simplement et donne $\pi/4x$.

Pour la troisième intégrale, on développe la fonction de Bose au deuxième ordre ce qui donne pour $x \to 0$:

$$-\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dy \left(\frac{y}{\sqrt{1+y^2}} - 1 \right) = \frac{1}{2}. \tag{1.20}$$

Pour la seconde intégrale, on effectue le changement de variable $\sqrt{2x}y = u$ et on prend l'ordre le plus bas en x lorsque $x \to 0$, l'ordre suivant étant en $\sqrt{x}$. On obtient la contribution :

$$\frac{1}{\sqrt{2x}} \int_0^{+\infty} du \left(\frac{1}{e^{u^2} - 1} - \frac{1}{u^2} \right) = -\frac{0.91514\ldots}{\sqrt{x}} \tag{1.21}$$

Finalement, lorsque $x \to 0$:

$$\mathcal{I}_3(x) = \frac{1}{2} + \frac{\pi}{4x} - \frac{0.91514\ldots}{\sqrt{x}} + o(1) \tag{1.22}$$

Il nous reste à déterminer les autres contributions à $\mathcal{I}_2(x)$. On les récrit sous la forme $\mathcal{I}_6(x) + \mathcal{I}_7(x)$ avec

$$\mathcal{I}_6(x) = \int_0^{+\infty} dy \left(\frac{1}{e^{2xy^2} - 1} - \frac{1}{2xy^2} \right) \tag{1.23}$$

qui se calcule exactement et donne $\mathcal{I}_6(x) = -0.91514/\sqrt{x}$, ainsi que

$$\mathcal{I}_7(x) = \int_0^{+\infty} dy \left(\frac{\sqrt{1+y^2}}{y} \frac{1}{e^{2xy\sqrt{y^2+1}} - 1} - \frac{1}{e^{2xy^2} - 1} + \frac{1}{2y(1+y)} \right). \tag{1.24}$$

Pour déterminer la contribution de cette dernière intégrale, on développe les fonctions de Bose $f(\alpha) = 1/(e^\alpha - 1)$ au deuxième ordre en α et on obtient :

$$\mathcal{I}_7(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dy \left(1 - \frac{\sqrt{1+y^2}}{y} + \frac{1}{y(1+y)} \right) + o(1) = \frac{1 - \ln 2}{2} + o(1) \tag{1.25}$$

En conclusion, on trouve le développement asymptotique suivant pour $\mathcal{I}(x)$ lorsque $x \to 0$:

$$\boxed{\mathcal{I}(x) = -\frac{1.8303\ldots}{\sqrt{x}} + \frac{\pi}{4x} + o(1)} \tag{1.26}$$

Bibliographie

[1] J. Bardeen, L.N. Cooper & J.R. Schrieffer, *Theory of superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).

[2] P.Fulde & R.A. Ferrell, *Superconductivity in a strong spin-exchange field*, Phys. Rev. **135**, A550 (1964).

[3] A.I. Larkin & Y.N. Ovchinnikov, *Inhomogeneous state of superconductors*, Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965).

[4] Roberto Casalbuoni & Giuseppe Nardulli, *Inhomogeneous Superconductivity in Condensed Matter and QCD*, Rev. Mod. Phys. **76**, 263 (2004).

[5] L.N. Cooper, *Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas*, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).

[6] L. Landau, E. Lifschitz & L. Pitayevski, *Physique statistique 2^e partie*, volume 9 (Mir, 1990).

[7] H. Fröhlich, *Theory of the Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero of Temperature*, Phys. Rev. **79**, 845 (1950).

[8] L.P. Gorkov, *On the energy spectrum of superconductors*, Sov. Phys. JETP **9**, 505 (1958), *Microscopic derivation of the Ginzburg-Landau equations in the theory of superconductuvity*, Sov. Phys. JETP **9**, 1364 (1959) et *Theory of superconducting alloys in a strong magnetic field near the critical temperature*, Sov. Phys. JETP **10**, 998 (1960).

[9] X.Leyronas, *Longueur de London et symétrie du paramètre d'ordre dans les cuprates supraconducteurs : aspects théoriques*, Thèse de doctorat, Université Paris VI (1997).

[10] A. J. Leggett, *Theory of a Superfluid Fermi Liquid. I. General Formalism and Static Properties*, Phys. Rev. **140**, A1869 (1965), ainsi que *Theory of a Superfluid Fermi Liquid. II. Collective Oscillations*, Phys. Rev. **147** 119 (1966).

[11] A.M. Clogston, *Upper Limit for the Critical Field in Hard Superconductors*, Phys. Rev. Lett. **9**, 266 (1962).

[12] B.S. Chandrasekhar, *A note on the maximum critical field of high-field superconductors*, Appl. Phys. Lett. **1**, 7 (1962).

[13] A.A. Abrikosov, *On the magnetic properties of superconductors of the second group*, Sov. Phys. JETP **5**, 1174 (1957).

[14] L.G. Aslamazov, *Influence of impurities on existence of an inhomogeneous state in a ferromagnetic superconductor*, Sov. Phys. JETP **28**, 773 (1969).

[15] E.J. Thomas D. Saint-James, G. Sarma, *Type II superconductivity* (Pergamon Press, Oxford, 1969).

[16] S. Takada, *Superconductivity in a molecular field. II*, Prog. Theor. Phys. **43**, 27 (1970).

[17] L.W. Gruenberg & L. Gunther, *Fulde-Ferrel effect in type-II superconductors*, Phys. Rev. Lett. **16**, 996 (1966).

[18] M.Tachiki, S. Takahashi, P. Gegenwart, M. Weiden, M. Lang, C. Geibel, F. Steglich, R.Modler, C.Paulsen & Y.Onuki, *Generalized Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov state in heavy fermion and intermediate-valence systems*, Z. Phys. B **100**, 369 (1996).

[19] M. Houzet & A. Buzdin, *Structure of the vortex lattice in the Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov state*, Phys. Rev. B **63**, 184521 (2001).

[20] A.D. Huxley, C. Paulsen, O. Laborde, J.L. Tholence, D. Sanchez, A. Junod & R. Caemczuk, *Flux pinning, specific heat and magnetic properties of the laves phase superconductor $CeRu_2$.*, J. Phys. Cond. Matter **5**, 7709 (1993).

[21] K.Gloss, K.Modler, H.Schimanski, C.D. Bredl, C.Geibel, F.Steglich, A.I. Buzdin, N.Sato & T.Komatsubara, *Possible formation of a nonuniform superconducting state in the heavy-fermion compound UPd_2Al_3*, Phys. Rev. Lett. **70**, 501 (1993).

[22] F.Thomas, B.Wand, T.Lühmann, P.Gegenwart, G.R. Stewart & F.Steglich, *Strong coupling effects on the upper critical field of the heavy-fermion superconductor UBe_{13}*, J. Low. Temp. **102**, 117 (1996).

[23] J.P. Brison, A. Buzdin, L. Glémot, F.Thomas & J.Flouquet, *Upper critical field of heavy fermion superconductors*, Physica B **230**, 406 (1997).

[24] A .Bianchi, R. Movshovich, C. Capan, P.G. Pagliuso & J.L. Sarrao, *Possible Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov State in $CeCoIn_5$*, Phys. Rev. Lett. **91**, 187004 (2003).

[25] K. Aoi, W. Dieterich & P.Fulde, *Layered Superconductors in High Magnetic Fields*, Z. Physik **267**, 223 (1974).

[26] H. Shimahara, *Fulde-Ferrell state in quasi-two-dimensional superconductors*, Phys. Rev. B **50**, 12760 (1994).

[27] L.N. Bulaevskii, *Magnetic properties of layered superconductors with weak interaction between the layers*, Sov. Phys. JETP **37**, 1133 (1973).

[28] L.N. Bulaevskii, *Inhomogeneous state and the anisotropy of the upper critical field in layered superconductors with Josephson layer interaction*, Sov. Phys. JETP **38**, 634 (1974).

[29] A.I. Buzdin & J.P. Brison, *Non-uniform state in 2D superconductors*, Europhys. Lett. **35**, 707 (1996).

[30] H. Shimahara & D. Rainer, *Crossover from Vortex States to the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov State in Two-Dimensional s- and d-Wave Superconductors*, J. Phys. Soc. Japan **66**, 3591 (1997).

[31] U.Klein, D.Rainer & H.Shimahara, *Interplay of Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov states in two-dimensional superconductors*, J. Low Temp. Phys. **118**, 91 (2000).

[32] M. Houzet & A. Buzdin, *Influence of the paramagnetic effect on the vortex lattice in 2D superconductors*, Europhys. Lett. **50**, 375 (2000).

[33] M. Houzet, A.Buzdin, L.Bulaeskii & M. Maley, *New superconducting phases in field-induced organic superconductor λ-$(BETS)_2FeCl_4$*, Phys. Rev. Lett. **88**, 227001 (2002).

[34] J. Singleton, J.A. Symington, M-S Nam, A. Ardavan, M. Kurmoo & P. Day, *Observation of the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state in the quasi-two-dimensional organic superconductor κ-$(BEDT\text{-}TTF)_2Cu(NCS)_2$*, J. Phys. : Condens. Matter **12**, L641 (2000).

[35] M.A. Tanatar, T. Ishiguro, H.Tanaka & H.Kobayashi, *Magnetic field - temperature phase diagram of quasi-two-dimensional organic superconductor lambda-$(BETS)_2$ $GaCl_4$ studied via thermal conductivity*, Phys. Rev. B **66**, 134503 (2002).

[36] G. Yin & K.Maki, *Fulde-Ferrell state in heavy-fermion superconductors*, Phys. Rev. B **48**, 650 (1993).

[37] H.Burkhardt & D.Rainer, *Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state in layered superconductors*, Ann. Physik **3**, 181 (1994).

[38] S.Matsuo, H. Shimahara & K.Nagai, *Order parameter mixing effect in the Fulde-Ferrell state*, J. Phys. Soc. Japan **63**, 2499 (1994).

[39] R. Combescot, *BCS superfluidity in ultracold gases with unequal atomic populations*, Europhys. Lett. **55 (2)**, 150 (2001).

[40] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman & E.A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atom ic vapor below 200 nanokelvins*, Science **269**, 198 (1995).

[41] K.B Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn & W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*, Phys. Rev. Lett. **75 (22)**, 3969 (1995).

[42] W.Ketterle, *Bose-Einstein condensation in dilute atomic gases : atomic physics meets condensed matter physics*, Physica B **280**, 11 (2000).

[43] H.T.C. Stoof, M. Houbiers, C.A. Sackett & R.G. Hulet, *Superfluidity of Spin-Polarized ^6Li*, Phys. Rev. Lett. **10**, 76 (1996).

[44] M. Houbiers, R. Ferwerda, H.T.C. Stoof, W.I. McAlexander, C.A. Sackett & R.G. Hulet, *Superfluid state of atomic ^6Li in a magnetic trap*, Phys. Rev. A **56**, 4864 (1997).

[45] B. DeMarco & D.S. Jin, *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*, Science **285**, 1703 (1999).

[46] F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, & C. Salomon, *Quasipure Bose-Einstein Condensate Immersed in a Fermi Sea*, Phys. Rev. Lett. **87**, 80403 (2001).

[47] Andrew G. Truscott, Kevin E. Strecker, William I. McAlexander, Guthrie B. Partridge & Randall G. Hulet, *Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms*, Science **291**, 2570 (2001).

[48] Z. Hadzibabic, C. A. Stan, K. Dieckmann, S. Gupta, M. W. Zwierlein, A. Görlitz, & W. Ketterle, *Two-Species Mixture of Quantum Degenerate Bose and Fermi Gases*, Phys. Rev. Lett. 88 **88**, 160401 (2002).

[49] K. M. O'Hara, S. L. Hemmer, M. E. Gehm, S. R. Granade & J. E. Thomas, *Observation of a Strongly Interacting Degenerate Fermi Gas of Atoms*, Science **298**, 2179 (2002).

[50] K. Dieckmann, C. A. Stan, S. Gupta, Z. Hadzibabic, C. H. Schunck, & W. Ketterle, *Decay of an Ultracold Fermionic Lithium Gas near a Feshbach Resonance*, Phys. Rev. Lett. **89**, 203201 (2002).

[51] T. Bourdel, J. Cubizolles, L. Khaykovich, K. M. F. Magalhaes, S. J. J. M. F. Kokkelmans, G. V. Shlyapnikov & C. Salomon, *Measurement of interaction energy near a Feshbach resonance in a 6Li Fermi gas*, Phys. Rev. Lett. **91**, 020402 (2003).

[52] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, NY, 1987).

[53] E. Timmermans, P. Tommasini, M. Hussein & A. Kerman, *Feshbach resonances in atomic Bose-Einstein condensates*, Phys. Reports **315**, 199 (1999).

[54] R. Combescot, *Feshbach Resonance in Dense Ultracold Fermi Gases*, Phys. Rev. Lett. **91**, 120401 (2003).

[55] M. Holland, S. J. J. M. F. Kokkelmans, M. L. Chiofalo & R. Walser, *Resonance Superfluidity in a Quantum Degenerate Fermi Gas*, Phys. Rev. Lett. **87**, 120406 (2001).

[56] V. Ambegaokar, *Superconductivity*, volume I, chapter 5 (M. Dekker, New York, 1969), édité par R.D. Parks.

[57] Leo P. Kadanoff & Paul C. Martin, *Theory of Many-Particle Systems. II. Superconductivity*, Phys. Rev. **124**, 670 (1961).

[58] G. Bruun, Y. Castin, R. Dum & K. Burnett, *BCS theory for trapped ultracold fermions*, Eur. Phys. J. D **7**, 433 (1999).

[59] V.M. Galitskii, *The Energy Spectrum of a Non-Ideal Fermi Gas*, Sov. Phys. JETP **7**, 104 (1958).

[60] H.Heiselberg, C.J. Pethick, H. Smith & L.Viverit, *Influence of induced interactions on the superfluid transition in dilute Fermi gases*, Phys. Rev. Lett. **85**, 2418 (2000).

[61] I.E. Dzyaloshinskii A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, *Methods of Quantum Field Theory* (Dover Publications, 1963).

[62] L.P. Gorkov & T.K. Melik-Barkhudarov, *Contribution to the theory of superfluidity in an imperfect Fermi gas*, Sov. Phys. JETP **13**, 1018 (1961).

[63] R. Combescot, *Trapped ^6Li : A high T_c Superfluid ?*, Phys. Rev. Lett. **83**, 3766 (1999).

[64] A.I. Buzdin & V.V. Tugushev, *Phase diagrams of electronic and superconducting transitions to soliton lattice*, Sov. Phys. JETP **58**, 428 (1983).

[65] A.I. Buzdin & S.V. Polonskii, *Nonuniform state in quasi-1D superconductors*, Sov. Phys. JETP **66**, 422 (1987).

[66] K. Machida & H. Nakanishi, *Superconductivity under a ferromagnetic molecular field*, Phys. Rev. B **30**, 122 (1984).

[67] Anthony J. Leggett, *A theoretical description of the new phases of liquid ^3He*, Rev. Mod. Phys. **47**, 331 (1975).

[68] G.Eilenberger, *Ableitung verallgemeinerter Ginzburg-Landau-Gleichungen für reine Supraleiter aus einem Variationsprinzip*, Z. Phys. **182**, 427 (1965).

[69] P.-G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Addison-Wesley, New York, 1989).

[70] J.P. Blaizot & G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems* (The MIT Press, 1987).

[71] H. Shimahara, *Structure of the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov State in two-dimensional Superconductors*, J. Phys. Soc. Japan **3**, 736 (1998).

[72] J.A. Bowers & K. Rajagopal, *Crystallography of color superconductivity*, Phys. Rev. D **66**, 065002 (2002).

[73] A. Malaspinas & T.M. Rice, *On the order of itinerant antiferromagnetic phase transitions and superconducting phase transitions in an exchange field*, Phys. Kondens. Materie **13**, 193 (1971).

[74] K. Nakanishi & K. Maki, *First-order phase transition in itinerant antiferromagnetism*, Prog. Theor. Phys. **48**, 1059 (48).

[75] A.I. Buzdin & M.L. Kulic, *Unusual behavior of superconductors near the tricritical Lifshitz point*, J. Low Temp. Phys. **54**, 203 (1983).

[76] A.I. Buzdin & H. Kachkachi, *Generalized Ginzburg-Landau theory for nonuniform FFLO superconductors*, Phys. Lett. A **225**, 341 (1997).

[77] M. Houzet, Y.Meurdesoif, O.Coste & A.Buzdin, *Structure of the non-uniform Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikovstate in 3 D superconductors*, Physica C **316**, 89 (1999).

[78] D.F. Agterberg & K.Yang, *The effect of impurities on Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov superconductors*, J. Phys. Condens. Mat. **13**, 2001 (2001).

[79] S. Matsuo, S. Higashitani, Y.Nagato & K.Nagai, *Phase diagram of the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state in a three-dimensional superconductor*, J. Phys. Soc. Japan **67**, 280 (1998).

[80] S. Takada & T. Izuyama, *Superconductivity in a molecular field. I*, Prog. Theor. Phys. **41**, 635 (1969).

[81] G. Eilenberger, *Transformation of Gorkov's equation for type II superconductors into transport-like equations*, Z. Phys. **214**, 195 (1968).

[82] G. Eilenberger, *General approximation method for the free energy functional oof superconducting alloys*, Z. Phys. **190**, 142 (1966).

[83] A.I. Larkin & Y.N. Ovchinnikov, *Quasiclassical method in the theory of superconductivity*, Sov. Phys. JETP **28**, 1200 (1969).

[84] J.W. Serene & D. Rainer, *The quasiclassical approach to superfluid ^3He*, Physics Reports **101**, 221 (1983).

[85] W. Belzig, F.K. Wilhelm, C. Bruder, G. Schön & A.D. Zaikin, *Quasiclassical Green's function approach to mesoscopic superconductivity*, Superlattices and Microstructures **25**, 1251 (1999).

[86] A. Griffin, D. Snoke & S. Stringari, éditeurs, *Bose-Einstein Condensation* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).

[87] Vanderlei Bagnato & Daniel Kleppner, *Bose-Einstein condensation in low-dimensional traps*, Phys. Rev. A **44**, 7439 (1991).

[88] Wolfgang Ketterle & N. J. van Druten, *Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions*, Phys. Rev. A **54**, 656 (1996).

[89] J.W. Kane & L.P. Kadanoff, *Long-Range Order in Superfluid Helium*, Phys. Rev. **155**, 80 (1967).

[90] C. Yang & C. Yang, *Thermodynamics of a One-Dimensional System of Bosons with Repulsive Delta-Function Interaction*, J. Math. Phys. **10**, 1115 (1969).

[91] N. D. Mermin & H. Wagner, *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*, Phys. Rev. Lett. **22**, 1133 (1966).

[92] P. C. Hohenberg, *Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions*, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).

[93] A. Görlitz, J.M. Vogels, A.E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S.Gupta & S. Inouye AN, *Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).

[94] M. Olshanii, *Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons*, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).

[95] D. S. Petrov, M. Holzmann & G.V. Shlyapnikov, *Bose-Einstein Condensation in Quasi-2D Trapped Gases*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2551 (2000).

[96] Markus Greiner, Immanuel Bloch, Olaf Mandel, Theodor W. Hänsch & Tilman Esslinger, *Exploring Phase Coherence in a 2D Lattice of Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **87**, 160405 (2001).

[97] S. Dettmer, D. Hellweg, P. Ryytty, J. J. Arlt, W. Ertmer, K. Sengstock, D. S. Petrov & G. V. Shlyapnikov, *Observation of Phase Fluctuations in Elongated Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **87**, 160406 (2001).

[98] S. Richard, F. Gerbier, J. H. Thywissen, M. Hugbart, P. Bouyer & A. Aspect, *Momentum Spectroscopy of 1D Phase Fluctuations in Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **91**, 010405 (2003).

[99] N. Bogoliubov, *On the the theory of superfluidity*, J. Phys. USSR **11**, 23 (1947).

[100] C. Gardiner, *Particle-number-conserving Bogoliubov method which demonstrates the validity of the time-dependent Gross-Pitaevskii equation for a highly condensed Bo*, Phys. Rev. A **56**, 1414 (1997).

[101] Y. Castin & R. Dum, *Low-temperature Bose-Einstein condensates in time-dependent traps : Beyond the U(1) symmetry-breaking approach*, Phys. Rev. A **57**, 3008 (1998).

[102] V.N. Popov, *Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics* (Reidel, Dordrecht, 1983).

[103] Yu. Kagan, B.V. Svistunov & G.V. Shlyapnikov, *Influence on inelastic processes of the phase transition in a weakly collisional two-dimensional Bose gas*, Sov. Phys. JETP **66**, 314 (1987).

[104] Y. Castin, R. Dum, E. Mandonnet, A. Minguzzi & I. Carusotto, *Coherence properties of a continuous atom laser*, J. Mod. Opt. **47**, 2671 (2000).

[105] I. Carusotto & Y. Castin, *An exact stochastic field method for the interacting Bose gas at thermal equilibrium*, J. Phys. B **34**, 4589 (2001).

[106] D. S. Petrov, G.V. Shlyapnikov & J.T.M. Walraven, *Regimes of Quantum Degeneracy in Trapped 1D Gases*, Phys. Rev. Lett. **85**, 3745 (2000).

[107] T-L. Ho & M. Ma, *Quasi 1 and 2d dilute Bose gas in magnetic traps : Existence of Off-Diagonal Order and Anomalous Quantum Fluctuations*, J. Low Temp. Phys. **115**, 61 (1999).

[108] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov & J. T. M. Walraven, *Phase-Fluctuating 3D Bose-Einstein Condensates in Elongated Traps*, Phys. Rev. Lett. **87**, 050404 (2001).

[109] S.I. Shevchenko, *On the theory of a Bose gas in a nonuniform field*, Sov. J. Low Temp. Phys. **18**, 223 (1992).

[110] Yu. Kagan, V. A. Kashurnikov, V. Krasavin, N. V. Prokof'ev & B. V. Svistunov, *Quasicondensation in a two-dimensional interacting Bose gas*, Phys. Rev. A **61**, 043608 (2000).

[111] Nikolay Prokof'ev & Boris Svistunov, *Two-dimensional weakly interacting Bose gas in the fluctuation region*, Phys. Rev. A **66**, 043608 (2002).

[112] M. Schwartz, *Bose-Einstein condensation in an interacting Bose liquid*, Phys. Rev. A **10**, 1858 (1974).

[113] J. O. Andersen, U. Al Khawaja & H. T. C. Stoof, *Phase Fluctuations in Atomic Bose Gases*, Phys. Rev. Lett. **88**, 070407 (2002).

[114] U. Al Khawaja, J. O. Andersen, N. P. Proukakis & H. T. C. Stoof, *Low dimensional Bose gases*, Phys. Rev. A **66**, 013615 (2002).

[115] U. Al Khawaja, J. O. Andersen, N. P. Proukakis & H. T. C. Stoof, *Erratum : Low-dimensional Bose gases [Phys. Rev. A 66, 013615 (2002)]*, Phys. Rev. A **66**, 059902 (2002).

[116] E.H. Lieb & W. Liniger, *Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State*, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).

[117] Elliott H. Lieb, *Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum*, Phys. Rev. **130**, 1616 (1963).

[118] M. Gaudin, *La Fonction d'Onde de Bethe* (Masson, Paris, 1983).

[119] D.M. Gangardt & G.V. Shlyapnikov, *Stability and Phase Coherence of Trapped 1D Bose Gases*, Phys. Rev. Lett. **90**, 010401 (2003).

[120] Chiara Menotti & Sandro Stringari, *Collective oscillations of a one-dimensional trapped Bose-Einstein gas*, Phys. Rev. A **66**, 043610 (2002).

[121] R. Combescot & X. Leyronas, *Hydrodynamic Modes in Dense Trapped Ultracold Gases*, Phys. Rev. Lett. **89**, 190405 (2002).

[122] V. Dunjko, V. Lorent & M. Olshanii, *Bosons in Cigar-Shaped Traps : Thomas-Fermi Regime, Tonks-Girardeau Regime, and In Between*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5413 (2001).

[123] W-C. Wu & A. Griffin, *Quantized hydrodynamic model and the dynamic structure factor for a trapped Bose gas*, Phys. Rev. A **54**, 4204 (1996).

[124] S.M. Barnett & D.C. Pegg, *The Hermitian Optical Phase Operator*, in S. Reynaud, E. Giacobino & J. Zinn-Justin, éditeurs, *Fluctuations Quantiques, école d'été des Houches* 1995, p. 563 (Elsevier, 1997).

[125] S. Stringari, *Collective Excitations of a Trapped Bose-Condensed Gas*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2360 (1996).

[126] Maxim Olshanii & Ludovic Pricoupenko, *Rigorous Approach to the Problem of Ultraviolet Divergencies in Dilute Bose Gases*, Phys. Rev. Lett. **88**, 010402 (2002).

[127] M. Lewenstein & Li You, *Quantum Phase Diffusion of a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3489 (1996).

[128] Vincent Liu, *Theoretical Study of the Damping of Collective Excitations in a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **79**, 4056 (1997).

[129] L. P. Pitaevskii & S. Stringari, *Landau damping in dilute Bose gases*, Phys. Lett. A **235**, 398 (1997).

[130] P. O. Fedichev & G. V. Shlyapnikov, *Finite-temperature perturbation theory for a spatially inhomogeneous Bose-condensed gas*, Phys. Rev. A **58**, 3146 (1998).

[131] M. Schick, *Two-Dimensional System of Hard-Core Bosons*, Phys. Rev. A **3**, 1067 (1971).

[132] Daniel S. Fisher & P. C. Hohenberg, *Dilute Bose gas in two dimensions*, Phys. Rev. B **37**, 4936 (1988).

[133] T.D. Lee & C.N. Yang, *Many-Body Problem in Quantum Mechanics and Quantum Statistical Mechanics*, Phys. Rev. **105**, 1119 (1957).

[134] M. Schwartz, *Off-diagonal long-range behavior of interacting Bose systems*, Phys. Rev. B **15**, 1399 (1977).

[135] V. N. Popov, *Long-wave asymptotic form of the many-body Green's functions of a one-dimensional Bose gas*, JETP Letters **31**, 526 (1980).

[136] F.D.M. Haldane, *Effective Harmonic-Fluid Approach to Low-Energy Properties of One-Dimensional Quantum Fluids*, Phys. Rev. Lett. **47**, 1840 (1981).

[137] M. Olshanii & V. Dunjko, *Short-Distance Correlation Properties of the Lieb-Liniger System and Momentum Distributions of Trapped One-Dimensional Atomic Gases*, Phys. Rev. Lett. **91**, 090401 (2003).

[138] S. Beliaev, *Energy spectrum of a non-ideal Bose gas*, Sov. Phys. JETP **7**, 299 (1958).

Publication I

Transition to Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov phases near the tricritical point : an analytical study

Eur. Phys. J. B **28**, 397–406 (2002)
DOI: 10.1140/epjb/e2002-00243-5

THE EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL B

Transition to Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov phases near the tricritical point: an analytical study

R. Combescot[a] and C. Mora

Laboratoire de Physique Statistique, École Normale Supérieure[b], 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

Received 20 February 2002 / Received in final form 4 June 2002
Published online 13 August 2002 – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2002

Abstract. We explore analytically the nature of the transition to the Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov superfluid phases in the vicinity of the tricritical point, where these phases begin to appear. We make use of an expansion of the free energy up to an overall sixth order, both in order parameter amplitude and in wavevector. We first explore the minimization of this free energy within a subspace, made of arbitrary superpositions of plane waves with wavevectors of different orientations but same modulus. We show that the standard second order FFLO phase transition is unstable and that a first order transition occurs at higher temperature. Within this subspace we prove that it is favorable to have a real order parameter and that, among these states, those with the smallest number of plane waves are preferred. This leads to an order parameter with a $\cos(\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r})$ dependence, in agreement with preceding work. Finally we show that the order parameter at the transition is only very slightly modified by higher harmonics contributions when the constraint of working within the above subspace is released.

PACS. 74.20.Fg BCS theory and its development – 74.60.Ec Mixed state, critical fields, and surface sheath

1 Introduction

Although they have been proposed a long time ago, Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) phases [1,2] are still the subject of a continuing interest. Indeed the existence of these phases is a fairly remarkable phenomenon since they correspond to a spontaneous symmetry breaking of the standard BCS superfluid phase in the presence of an effective field, inducing a difference in chemical potential between the two populations involved in the formation of Cooper pairs. This symmetry breaking leads to an inhomogeneous superfluid with a space dependent order parameter, while the applied field is perfectly homogeneous. This situation is analogous to the appearance of vorticity in type II superconductors, but in this latter case the effect is due to the coupling of the field to particle currents while in FFLO phases only the coupling to the spin of the pairing fermions is involved. In standard superconductors the coupling to the orbital degrees of freedom is much stronger than the coupling to the spins. Hence the upper critical field is due to the orbital coupling and the FFLO phases can not be observed, since they should appear at much higher field. However in heavy fermions superconductors the strength of these two couplings is comparable, which could make possible the observation of FFLO phases. Nevertheless their sensitivity to impurities could be a major problem. Another possible direction to eliminate the orbital coupling is to consider lower dimensional superconductors, in a geometry where the currents would have to flow in an actually prohibited direction. Organic compounds or cuprate superconductors are interesting systems in this respect. And indeed very recently the FFLO state has been claimed to be observed in a quasi-two-dimensional organic compound [3]. On the other hand earlier possible observations in heavy fermion compounds [4] have not been undisputed. We note in particular that the analysis of experimental results relies very often heavily on the theoretical results, but we will see that the situation is not completely satisfactory in this respect.

Another class of physical systems where FFLO phases could be observed is coming up quite recently. These are the ultracold fermionic gases. As it is well known remarkably low temperatures have been obtained on bosonic gases, leading in particular to the observation of Bose-Einstein condensation in alkali ultracold gases. More recently fermionic gases have been cooled down in the degenerate regime [5–7] and reaching a BCS superfluid transition in these systems seems a reasonable possibility [8,9].

[a] e-mail: combesco@lps.ens.fr
[b] Laboratoire associé au Centre National de la Recherche Scientifique et aux Universités Paris 6 et Paris 7

However in the systems considered for observing this transition there is, in contrast to electronic spin relaxation in superconductors, no fast relaxation mechanism to equalize the populations of the two fermion species involved in the formation of Cooper pairs. Hence one should have no limitation to the effective field in these systems since the number of atoms in the populations can be in principle obtained at will. So the difference in atomic populations looks as a very promising control parameter. On the other hand if this parameter is not fully controlled this might very well be a major difficulty in reaching the BCS transition in these systems [10,11]. Let us also mention that FFLO phases are of high interest for quark matter [12] which is expected to be found in the core of compact stars.

In contrast with this raising experimental interest there are still theoretical problems with the precise nature of the possible phases. Specifically the basic FFLO instability corresponds to have pairs formed with a total nonzero momentum $\mathbf{q}_0$ instead of forming pairs $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ with zero total momentum as in the standard BCS phase. This gives rise to a spatial dependence $\exp(\mathrm{i}\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r})$ for the order parameter, which leaves a degeneracy with respect to the orientation of $\mathbf{q}_0$. This has been investigated by [2] Larkin and Ovchinnikov (LO) who looked how it is lifted right below the critical field. In this case, when considering the spatial dependence of the order parameter $\Delta(\mathbf{r})$, one can restrict the investigation to the subspace generated by linear combination of the plane waves $\exp(\mathrm{i}\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r})$ with all possible directions $\mathbf{q}_0$. At $T = 0$, LO looked for periodic structures and found that the energetically favored result is a second order transition to a one-dimensional 'planar' texture $\Delta(\mathbf{r}) \sim \cos(\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r})$. However they left open in their paper the possibility of a first order transition. Actually when considering the three-dimensional 'cubic' texture $\Delta(\mathbf{r}) \sim \cos(q_0 x) + \cos(q_0 y) + \cos(q_0 z)$ they found that it is energetically unfavorable compared to the normal state. Nevertheless they obtained from the gap equation that a nonzero solution for this order parameter exists *above* the FFLO transition line. In terms of the expansion of the free energy in powers of the order parameter, schematically $\Omega = \alpha_2 \Delta^2 + \alpha_4 \Delta^4$, this situation corresponds to a positive coefficient α_2 for the second order term and a negative coefficient α_4 for the fourth order one, just the opposite of the standard Landau-Ginzburg expansion below the transition. The LO evaluation of the related free energy corresponds actually to the maximum $\alpha_2^2/4|\alpha_4|$ of this free energy. Beyond this maximum the free energy decreases, and it would go to $-\infty$ if one would consider only the second and fourth order terms. Naturally one has to include the effect of all higher order terms in order to find the value of the free energy for large values of the order parameter. However, at the FFLO transition line and slightly above it, the free energy becomes negative for values of the order parameter (specifically for $\Delta^2 = \alpha_2/|\alpha_4|$) where only the second and fourth order terms have to be kept in the expansion. This shows definitely that the transition toward the FFLO phase occurs *above* the standard second order FFLO transition line and is actually first order, because one can display in this range a solution which has a lower free energy than the normal state. On the other hand in order to obtain consistently the order parameter which gives the lowest free energy one has naturally to take into account higher order terms. In particular it is by no means obvious that the cubic phase is the stable one. Moreover when higher order terms are considered there are no reason anymore to restrict the search to the subspace generated by the plane waves $\exp(\mathrm{i}\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r})$.

In order to explore more fully this difficult problem with easier conditions, it is better to be able to proceed to some kind of expansion. This can be done if, instead of working at $T = 0$, one explores the vicinity of the tricritical point (TCP), where the FFLO transition line starts. It is located at $T_{\mathrm{tcp}}/T_{c0} = 0.561$ where T_{c0} is the critical temperature for $\bar{\mu} = 0$, with $2\bar{\mu} = \mu_\uparrow - \mu_\downarrow$ being half the chemical potential difference between the two fermionic populations forming pairs. The corresponding effective field is $\bar{\mu}_{\mathrm{tcp}}/T_{c0} = 1.073$. At this point, in the free energy expansion, both the coefficient of the second order term α_2 and the coefficient of the fourth order term α_4 vanish. Naturally α_2 is zero just because the TCP is on the standard second order phase transition line. On the other hand following this transition line one has $\alpha_4 > 0$ for $T > T_{\mathrm{tcp}}$ and $\alpha_4 < 0$ for $T < T_{\mathrm{tcp}}$. In our case the change of sign of α_4 at T_{tcp} is the origin of the FFLO instability, because it happens accidentally that this same coefficient controls also the wavevector dependence of α_2 (this is seen explicitely in Eqs. (7, 8) below). Clearly, by continuity, the equilibrium order parameter will be small in the vicinity of the TCP since we know that it is zero just above the TCP on the second order line and it is small right below it in the superfluid phase. Therefore a power expansion of the free energy will be enough to find it. On the other hand, since the second and fourth order terms are zero at the TCP, we have clearly to expand at least up to sixth order, but this will prove to be enough because the corresponding coefficient is positive and not small. Similarly the optimum wavevector $\mathbf{q}_0$ corresponding to the FFLO phase will be small in the vicinity of the TCP since it is zero just above it on the second order line. This allows to proceed to a gradient expansion of the free energy. Since only even powers of the wavevector can enter and we look for a minimum as a function of this wavevector, we have to expand at least up to fourth order in gradient, but this will prove again to be enough.

This line of thought has actually already been followed by Houzet *et al.* [13,16], who have performed this expansion for the free energy and explored the result numerically. They have found that the energetically favored phase is the one-dimensional planar order parameter found by LO at $T = 0$, but that the transition is actually slightly first order, instead of second order as found by LO at $T = 0$. Our purpose in the present paper is rather to proceed to an analytical study of this problem. Indeed there are infinitely many possible order parameters in competition. And our aim, in considering the vicinity of the TCP, is to find the important ingredients which are responsible for the selection of the actual stable state and obtain a better physical understanding, having in particular in mind

the generalization to more complicated situations. Hence our paper is complementary to their work. In particular we obtain a first order transition to the one-dimensional planar order parameter, but we will be able to analyze the reasons which favor this phase. The transition to this planar order parameter has been actually explored numerically down to $T = 0$ by Matsuo *et al.* [14]. They have used quasiclassical equations and found that the transition keeps first order down to low temperature, but eventually goes to second order in agreement with LO. On the other hand since we know that at $T = 0$ the cubic phase is more stable than the planar one, the question of the stablest phase at low temperature is still unsolved. Finally this first order transition to the planar phase in the three-dimensional case is in contrast with the results of Burkhardt and Rainer [15] who found it to be second order in a two-dimensional space.

In the following section, for completeness and to set up our notations, we rederive the expression [16] of the free energy. After considering in Section 3 some simple situations, we explore in details the minimization of this free energy. This is done in Section 4 by restricting our search to the LO subspace for the order parameter, which is made of arbitrary superpositions of plane waves. In Section 5 we show that our results are only slightly modified when we release this restriction. Throughout the paper we restrict ourselves to the simplest BCS scheme, namely we will consider the free energy corresponding to a weak coupling isotropic Fermi system, ignoring in particular any Fermi liquid effect. Moreover we concentrate on the three-dimensional case which leads to a first order transition, and make only occasionally comparison with the two-dimensional situation where the transition is second order.

2 The free energy

There are various ways to obtain the explicit expression for the free energy we need in the vicinity of the TCP [17,18]. In practice it is convenient to use the fact [18] that, by varying the free energy with respect to $\Delta(\mathbf{r})$ one finds the gap equation, which is also easily obtained from Gorkovs equations, as done for example by LO [2]. The integral form of these equations is [17,19], with standard notations:

$$G_\uparrow(\mathbf{r},\mathbf{r}') = G^0_\uparrow(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \int \mathrm{d}\mathbf{r}_1 G^0_\uparrow(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\Delta(\mathbf{r}_1)F^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}') \tag{1}$$

$$F^+(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \int \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \bar{G}^0_\downarrow(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\Delta^*(\mathbf{r}_1)G_\uparrow(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}') \tag{2}$$

with, for the Fourier transforms of the free fermions thermal propagators, $G^0_\uparrow(\mathbf{k}) = (\mathrm{i}\omega_n - \xi_\mathbf{k} + \bar{\mu})^{-1}$ and $\bar{G}^0_\downarrow(\mathbf{k}) = (-\mathrm{i}\omega_n - \xi_k - \bar{\mu})^{-1}$ where $\xi_\mathbf{k}$ is the kinetic energy measured from the Fermi surface for $\bar{\mu} = 0$ and $\omega_n = \pi T(2n+1)$ are Matsubara frequencies. The order parameter is given by the self-consistency relation:

$$\Delta^*(\mathbf{r}) = VT\sum_n F^+(\mathbf{r},\mathbf{r}). \tag{3}$$

We expand equations (1–2) up to fifth order in $\Delta(\mathbf{r})$. We introduce the Fourier transform $\Delta_\mathbf{q} = \int \mathrm{d}\mathbf{r}\Delta(\mathbf{r})\exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$ of the order parameter. As explained in the introduction we proceed also to an expansion in the wavevector $\mathbf{q}$ of the order parameter since we know that its relevant values will be small in the vicinity of the TCP. More precisely we will see that, in order to obtain a coherent expansion, it is enough to go only up to fifth order terms in overall power of Δ and $\mathbf{q}$. This means that, in the gap equation, we have to expand the first order term in Δ only to fourth order in $\mathbf{q}$. Similarly the third order term in Δ has to be expanded only to second order in $\mathbf{q}$ and the fifth order term in Δ can be calculated to zeroth order in $\mathbf{q}$. For example in order to find the third order term, we have to expand up to second order in wavevectors:

$$\sum_k \bar{G}^0(\mathbf{k})G^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1)\bar{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}_3)G^0(\mathbf{k}+\mathbf{q})\Delta^*_{\mathbf{q}_1}\Delta_{\mathbf{q}_2}\Delta^*_{\mathbf{q}_3} \tag{4}$$

where we have used $\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}+\mathbf{q}_2$ and we have omitted the unnecessary spin index. In the expansion appear the following numerical coefficients:

$$a_0(\bar{\mu},T) = \tfrac{1}{N_0V} - 2\pi T\,\mathrm{Re}\left[\textstyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\bar{\omega}_n}\right]$$

$$a_2(\bar{\mu}/T) = -\bar{\mu}^2 2\pi T\,\mathrm{Re}\left[\textstyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\bar{\omega}_n^3}\right] \tag{5}$$

$$a_4(\bar{\mu}/T) = -\bar{\mu}^4 2\pi T\,\mathrm{Re}\left[\textstyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\bar{\omega}_n^5}\right]$$

where $\bar{\omega}_n = \omega_n - \mathrm{i}\bar{\mu}$, and the summation for a_0 has to be cut-off in the standard BCS way. The simple second order transition line to a standard BCS superfluid with space independent order parameter is given by $a_0(\bar{\mu},T) = 0$. Below the TCP it corresponds to a spinodal transition line, at which the normal state becomes absolutely unstable against a transition toward a space independent order parameter. The domain $a_0(\bar{\mu},T) > 0$ corresponds to the region of the $(\bar{\mu},T)$ phase diagram above this line, and it is the domain where we will look for other transitions. In practice we can see $a_0(\bar{\mu},T)$ as a measure of the distance from the spinodal line in the $(\bar{\mu},T)$ plane. Explicitely if we define $T_{sp}(\bar{\mu}/T)$ the spinodal temperature as a function of the ratio $\bar{\mu}/T$, we have $a_0(\bar{\mu},T) = \ln[T/T_{sp}(\bar{\mu}/T)]$. We will not need to explicit further this distance. As indicated in the introduction we have by definition $a_2(\bar{\mu}/T) = 0$ at the TCP and it is small in the vicinity of this point. For $(\bar{\mu}/T) > (\bar{\mu}/T)_{\mathrm{tcp}} = 1.91$, we have $a_2 > 0$ and $a_2 < 0$ for $(\bar{\mu}/T) < (\bar{\mu}/T)_{\mathrm{tcp}}$. Finally $a_4(\bar{\mu}/T) = 0.114$ at the TCP (while it is negative near $\bar{\mu} = 0$ and goes to -0.25 when

$T \to 0$). With these notations the gap equation in the vicinity of the TCP reads:

$$\Delta_{\mathbf{q}}\left[a_0-\frac{1}{3}a_2Q^2+\frac{1}{5}a_4Q^4\right]-\sum_{\mathbf{q}_i}\Delta_{\mathbf{q}_1}\Delta^*_{\mathbf{q}_2}\Delta_{\mathbf{q}_3}$$
$$\times\left[\frac{1}{2}a_2-\frac{1}{6}a_4\left(Q^2+2Q_1^2+2Q_3^2-\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{Q}_1+\mathbf{Q}_3)+3\mathbf{Q}_1\cdot\mathbf{Q}_3\right)\right]$$
$$+\frac{3}{8}a_4\sum_{\mathbf{q}_i}\Delta_{\mathbf{q}_1}\Delta^*_{\mathbf{q}_2}\Delta_{\mathbf{q}_3}\Delta^*_{\mathbf{q}_4}\Delta_{\mathbf{q}_5}=0 \quad (6)$$

where we have used the dimensionless wavevector $\mathbf{Q} = \mathbf{q}v_F/2\bar{\mu}$ and expressed $\Delta_{\mathbf{q}}$ in units of $\bar{\mu}$. Also the momentum conservation is assumed in the summations, that is $\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}+\mathbf{q}_2$ in the third order term and $\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_5 = \mathbf{q}+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_4$ in the fifth order one. The above expression can be checked against the case of the simple Fulde-Ferrell state $\Delta(\mathbf{r}) = \exp(\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{r})$ where a single wavevector enters.

Now the above gap equation is obtained by minimizing the following free energy difference Ω between the superfluid and the normal state:

$$\Omega=\sum_{\mathbf{q}}|\Delta_{\mathbf{q}}|^2\left[a_0-\frac{1}{3}a_2Q^2+\frac{1}{5}a_4Q^4\right]-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}_i}\Delta_{\mathbf{q}_1}\Delta^*_{\mathbf{q}_2}\Delta_{\mathbf{q}_3}\Delta^*_{\mathbf{q}_4}$$
$$\times\left[\frac{1}{2}a_2-\frac{1}{6}a_4(Q_1^2+Q_2^2+Q_3^2+Q_4^2+\mathbf{Q}_1\cdot\mathbf{Q}_3+\mathbf{Q}_2\cdot\mathbf{Q}_4)\right]+\frac{1}{8}a_4\sum_{\mathbf{q}_i}\Delta_{\mathbf{q}_1}\Delta^*_{\mathbf{q}_2}\Delta_{\mathbf{q}_3}\Delta^*_{\mathbf{q}_4}\Delta_{\mathbf{q}_5}\Delta^*_{\mathbf{q}_6} \quad (7)$$

where we have the momentum conservation $\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_2+\mathbf{q}_4$ in the fourth order term while $\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_5 = \mathbf{q}_2+\mathbf{q}_4+\mathbf{q}_6$ holds in the sixth order one. We have used symmetry and momentum conservation to present the fourth order term in a symmetrical way. This expression equation (7) is just the free energy we were looking for. It coincides exactly with the result of reference [16] once the differences in notations are taken into account. We have considered here the 3-D case. For a two-dimensional system the angular averages found in the calculation are different. The result is simply obtained from the above one by multiplying the Q^2 terms by 3/2 and the Q^4 terms by 15/8.

3 Simple cases

Let us first consider some simple situations. If we consider an homogeneous order parameter, that is $\mathbf{q} = 0$, we have merely $\Omega = a_0\Delta^2 - a_2\Delta^4/4 + a_4\Delta^6/8$. If we want to have this free energy negative for $a_0 > 0$ we need to have $a_2 > 0$, that is to be at temperature below the TCP. In this case $\Omega > 0$ when $a_0 > a_2^2/8a_4$ and we reach a first order transition for $a_0 = a_2^2/8a_4$, with a non zero order parameter $\Delta^2 = a_2/a_4$. This is the standard first order Pauli limiting transition. We consider next the possibility of a second order transition. In this case only the second order term in equation (7) is relevant. The location of this transition is given by $a_0 = \frac{1}{3}a_2Q^2 - \frac{1}{5}a_4Q^4$. Below the TCP, where $a_2 > 0$, we can find $a_0 > 0$ for non zero wavevector $\mathbf{Q}$, that is we will find an FFLO phase. Precisely the optimal wavevector is $Q_0^2 = \frac{5}{6}a_2/a_4$ and the corresponding maximal a_0 is $a_0 = \frac{5}{36}a_2^2/a_4$. We see that this value is larger than the one we just found for the standard Pauli limiting transition. Thus as expected the FFLO transition happens first and overtakes the first order transition. Finally it is natural and interesting to try to generalize the two above situations and consider the possibility of a first order transition for an order parameter with a single wavector component $\Delta_{\mathbf{q}}$. With the shorthand $\Delta_{\mathbf{q}} \equiv \Delta$ the free energy writes:

$$\Omega=\left[a_0-\frac{1}{3}a_2Q^2+\frac{1}{5}a_4Q^4\right]\Delta^2-\frac{1}{4}\left[a_2-2a_4Q^2\right]\Delta^4+\frac{1}{8}a_4\Delta^6. \quad (8)$$

Minimizing first with respect to Q^2 we obtain for the extremum the condition $Q^2 = \frac{5}{6}a_2/a_4 - \frac{5}{4}\Delta^2$, which implies that must have $\Delta^2 \leq \frac{2}{3}a_2/a_4$ otherwise we are back to the homogeneous situation and the Pauli limiting transition. Inserting this value for Q^2 in equation (8) we find $\Omega = \left[a_0 - \frac{5}{36}a_2^2/a_4\right]\Delta^2 + \frac{1}{6}a_2\Delta^4 - \frac{3}{16}a_4\Delta^6$. We are naturally interested in finding a transition higher than the standard FFLO. This means we are looking for $a_0 > \frac{5}{36}a_2^2/a_4$, so the first term in Ω is positive. But one sees that the sum of the last two terms is also positive for $\Delta^2 \leq \frac{2}{3}a_2/a_4$. Therefore we have not been able to improve the standard FFLO solution. However we have clearly not done our best in this direction.

Before trying to improve in this way, it is convenient to simplify our expression for the free energy by taking reduced units for the order parameter and the wavector, which come out naturally from our above discussion. We set $\Delta = (a_2/a_4)^{1/2}\bar{\Delta}$, $\mathbf{Q} = (a_2/a_4)^{1/2}\bar{\mathbf{q}}$, $a_0 = A_0a_2^2/a_4$ and $\Omega = (a_2^3/a_4^2)F$. This leads to rewrite equation (7) for the free energy as:

$$F=\sum_{\mathbf{q}}|\bar{\Delta}_{\mathbf{q}}|^2\left[A_0-\frac{1}{3}\bar{q}^2+\frac{1}{5}\bar{q}^4\right]-\sum_{\mathbf{q}_i}\bar{\Delta}_{\mathbf{q}_1}\bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2}\bar{\Delta}_{\mathbf{q}_3}\bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4}$$
$$\times\left[\frac{1}{4}-\frac{1}{12}(\bar{q}_1^2+\bar{q}_2^2+\bar{q}_3^2+\bar{q}_4^2+\bar{\mathbf{q}}_1\cdot\bar{\mathbf{q}}_3+\bar{\mathbf{q}}_2\cdot\bar{\mathbf{q}}_4)\right]$$
$$+\frac{1}{8}\sum_{\mathbf{q}_i}\bar{\Delta}_{\mathbf{q}_1}\bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2}\bar{\Delta}_{\mathbf{q}_3}\bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4}\bar{\Delta}_{\mathbf{q}_5}\bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_6}. \quad (9)$$

It is clear from this rescaling transformation and the resulting expression that, in the vicinity of the TCP (where a_2 is small), it is unnecessary to go beyond our sixth order expansion in Δ and $\mathbf{q}$. It is also of interest to rewrite this free energy as a functional of $\Delta(\mathbf{r})$ by Fourier transform. This gives, after by parts integrations:

$$F=\int \mathrm{d}\mathbf{r}\left[A_0|\bar{\Delta}|^2-\frac{1}{3}|\nabla\bar{\Delta}|^2+\frac{1}{5}|\nabla^2\bar{\Delta}|^2\right]$$
$$-\int \mathrm{d}\mathbf{r}\left[\frac{1}{4}|\bar{\Delta}|^4-\frac{1}{24}\left[2\left(\nabla|\bar{\Delta}|^2\right)^2+3\left(\nabla\bar{\Delta}^2\right)\left(\nabla\bar{\Delta}^{*2}\right)\right]\right]+\frac{1}{8}\int \mathrm{d}\mathbf{r}|\bar{\Delta}|^6. \quad (10)$$

4 The LO subspace

As emphasized by LO all the states corresponding to the same wavector $\bar{q}_0$ but with different orientation for $\bar{\mathbf{q}}_0$ are degenerate right on the FFLO transition line. This degeneracy is lifted, at least partially, when one goes into the superfluid phase because of the coupling between the various plane waves produced by the nonlinear terms in the free energy. When one investigates the states selected in this process, one has to consider the subspace:

$$\bar{\Delta}(\mathbf{r}) = \sum \Delta_{\mathbf{q}_0} \exp(\mathrm{i}\bar{\mathbf{q}}_0 \cdot \mathbf{r}) \tag{11}$$

of all the order parameters generated by these plane waves. We call this the LO subspace. In this section we will restrict to this subspace our search for the state appearing at the transition: we will look for the minimum of the free energy within this LO subspace. Actually LO looked for a lattice as a solution and restricted themselves to this kind of order parameter. However there is physically no basic reason to enforce this type of restriction. One could look for incommensurate structures or quasicrystal-like solutions. Even if these are not the lowest energy solution, they might be of interest as local solutions corresponding physically to defects. Therefore we have not set a periodicity condition on the solutions we have considered. Nevertheless let us indicate at once that the energetically favored solutions we have found within the LO subspace are actually periodic. Although considering only the LO subspace is an important restriction, it does not make the problem easy at all, although we solve it completely below.

Let us first show that, within this subspace, the standard FFLO transition line is not stable, and the transition is actually first order. With our reduced units the LO subspace corresponds to $\bar{\mathbf{q}}_0^2 = \frac{5}{6}$. This minimizes the coefficient of the second order term in equation (9). The FFLO transition line is then given by $A_0 = \frac{5}{36}$, which makes the second order term zero within the LO subspace. Let us then look at the fourth order term in equation (9). This amounts to calculate the functional derivative of the free energy on the FFLO transition line. In a standard second order phase transition it should always be positive, forcing the order parameter to be zero on the transition line. However in the present case it is not obvious that this is systematically so because of the interplay of the wavevectors in this term. Specifically we introduce a parameter β which describes this effect for any fixed order parameter $\Delta(\mathbf{r})$. It is defined by:

$$2\beta\bar{q}_0^2 \sum_{\mathbf{q}_i} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_1} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_3} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4} = \bar{q}_0^2 \sum_{\mathbf{q}_i} (\hat{\mathbf{q}}_1 \cdot \hat{\mathbf{q}}_3 + \hat{\mathbf{q}}_2 \cdot \hat{\mathbf{q}}_4) \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_1} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_3} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4} = -\int \bar{\Delta}^2 (\nabla \bar{\Delta}^*)^2 + \text{c.c.} \tag{12}$$

For the simple case of the FF solution we have merely $\beta = 1$. However this is the highest possible value and we can think of decreasing it, or even making it negative, by a proper choice of the order parameter in the LO space, although naturally $\beta \geq -1$. Then the fourth order term in equation (9) is given by $\left[\frac{1}{6}(\beta+2)\bar{q}_0^2 - \frac{1}{4}\right] \int |\bar{\Delta}|^4$ and has thus the same sign as $5\beta + 1$ when we take $\bar{q}_0^2 = \frac{5}{6}$. Hence for any order parameter with $\beta \leq -\frac{1}{5}$ the fourth order term is negative. We will find actually many such states. Now when we are on the FFLO transition line (the second order term is zero) and the fourth order term is negative, we decrease the free energy and make it negative just by taking the order parameter to be small and nonzero, which shows that the standard FFLO transition line is unstable. Naturally the larger the order parameter, the lower the free energy, but we have to stay in the range where the second and fourth order terms are the only ones important in our expansion, which means that the sixth order term is negligible. Then since we have a negative free energy, we can raise it back to zero by increasing A_0 beyond its value $\frac{5}{36}$ on the FFLO line, which means we go beyond this line in the $(\bar{\mu}, T)$ phase diagram. In this way the second order term becomes positive. Eventually we will be limited by the growth of the sixth order term. The transition we have found corresponds to positive second and sixth order terms and a negative fourth order one. The free energy becomes negative for a nonzero value of the order parameter. We have thus found a first order transition beyond the standard FFLO transition line. This discussion about the order of the transition is the exact analogue of the one we made in the introduction for the $T = 0$ situation.

Naturally it is of interest to minimize β since it is rather natural to expect that the states corresponding to the minimum will lead to the stronger instability toward the first order transition. We show now that $\beta \geq -\frac{1}{3}$, the equality $\beta = -\frac{1}{3}$ being obtained for *any* real order parameter. We make use of:

$$\int \left[\bar{\Delta}^2 (\nabla \bar{\Delta}^*)^2 - |\bar{\Delta}|^2 |\nabla \bar{\Delta}|^2\right] + \text{c.c.} = \int \left[\bar{\Delta} \nabla \bar{\Delta}^* - \text{c.c.}\right]^2 \leq 0 \tag{13}$$

where the equality occurs only for a real order parameter (within an irrelevant overall constant phase factor), and:

$$\int \left[\bar{\Delta}^2 (\nabla \bar{\Delta}^*)^2 + 2|\bar{\Delta}|^2 |\nabla \bar{\Delta}|^2\right] + \text{c.c.} = -\int |\bar{\Delta}|^2 (\bar{\Delta} \nabla^2 \bar{\Delta}^* + \text{c.c.}) = 2\bar{q}_0^2 \int |\bar{\Delta}|^4 \tag{14}$$

where the last step makes specific use of the form equation (11) for the order parameter. We have then:

$$-2\beta\bar{q}_0^2 \int |\bar{\Delta}|^4 = \int \bar{\Delta}^2 (\nabla \bar{\Delta}^*)^2 + \text{c.c.} \leq \int \left[\bar{\Delta}^2 (\nabla \bar{\Delta}^*)^2 - \frac{2}{3}\left[\bar{\Delta}^2 (\nabla \bar{\Delta}^*)^2 - |\bar{\Delta}|^2 |\nabla \bar{\Delta}|^2\right]\right] + \text{c.c.} = \frac{1}{3} \int [\bar{\Delta}^2 (\nabla \bar{\Delta}^*)^2 + 2|\bar{\Delta}|^2 |\nabla \bar{\Delta}|^2] + \text{c.c.} = \frac{2}{3}\bar{q}_0^2 \int |\bar{\Delta}|^4 \tag{15}$$

hence $\beta \geq -\frac{1}{3}$.

Together with β it is also intuitively convenient to consider γ defined by:

$$\gamma \int \mathrm{d}\mathbf{r}|\bar{\Delta}|^4 = \bar{q}_0^{-2} \int \mathrm{d}\mathbf{r} \left[\nabla|\bar{\Delta}|^2\right]^2 = \sum_{\mathbf{q}_i} (\hat{\mathbf{q}}_1 - \hat{\mathbf{q}}_2)^2 \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_1} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_3} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4} \quad (16)$$

which is easily seen to satisfy $\gamma = 1-\beta$ from equation (14). We are thus interested in maximizing γ. From the first expression in equation (16) it is intuitively clear that γ will be large when the (properly normalized) order parameter has strong spatial variations. In particular it will be better for $|\bar{\Delta}(\mathbf{r})|^2$ to have many nodes. This is more easily achieved if $\bar{\Delta}(\mathbf{r})$ has no imaginary part since in this case one has only to require that the real part is zero. This makes intuitively reasonable that γ is maximized by a real order parameter. One can also come to this conclusion from the Fourier expansion in equation (16) (or also from Eq. (12)): it is of interest to have as often as possible opposite wavevectors so that $(\hat{\mathbf{q}}_1 - \hat{\mathbf{q}}_2)^2$ takes as much as possible its maximum value, namely 4. One is thus naturally led to an order parameter which is a combination of $\cos(\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r} + \varphi_{\mathbf{q}_0})$ with real coefficients, the directions of the $\mathbf{q}_0$'s being free. This corresponds merely to require that $\bar{\Delta}(\mathbf{r})$ is real in equation (11) by taking $\Delta_{-\mathbf{q}_0} = \Delta^*_{\mathbf{q}_0}$. On the other hand, since any real order parameter gives the maximum γ, it is not necessary that these cosines have equal weight.

We can now come back to our free energy equation (9) and find the best solution within the LO subspace, since we have found that the minimum β is $-1/3$, as soon as the order parameter is real, which implies $\Delta_{-\mathbf{q}_0} = \Delta^*_{\mathbf{q}_0}$ in equation (11). We introduce a measure $\bar{\Delta}$ of the amplitude of the order parameter by setting:

$$\int \mathrm{d}\mathbf{r}|\bar{\Delta}|^2 = \sum_{\mathbf{q}_i} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_1} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2} = N_2 \bar{\Delta}^2 \quad (17)$$

where by definition $N_2 \equiv N$ is the number of plane waves coming in equation (11). If all the planed waves have same amplitude, $\bar{\Delta}$ is just the common value of these amplitudes. Then we define N_4 and N_6 by:

$$\int |\bar{\Delta}|^4 = \sum_{\mathbf{q}_i} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_1} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_3} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4} = N_4 \bar{\Delta}^4 \quad (18)$$

and:

$$\int |\bar{\Delta}|^6 = \sum_{\mathbf{q}_i} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_1} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_2} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_3} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_4} \bar{\Delta}_{\mathbf{q}_5} \bar{\Delta}^*_{\mathbf{q}_6} = N_6 \bar{\Delta}^6. \quad (19)$$

In these definitions we have used the same implicit convention of momentum conservation as in equation (6), that is $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2$ in equation (17), $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_4$ in equation (18) and $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_5 = \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_4 + \mathbf{q}_6$ in equation (19). For the simple plane wave considered in equation (8), we had $N_2 = N_4 = N_6 = 1$. For the real order parameter we are interested in, the set of wavevectors $\{\mathbf{q}_i\}$ is made of $N/2$ pairs. If all the planed waves have same amplitude, one finds [20] for example by simple counting that $N_4 = 3N(N-1)$ and $N_6 = 5N(3N^2 - 9N + 8)$. Actually, once it is recognized that, from the counting procedure, N_4 and N_6 are polynomials in N of order 2 and 3 respectively, the coefficient may easily be found by considering the cases $N = 2, 4, 6$. With these notations the free energy equation (9) reduces to:

$$F = N_2 \bar{\Delta}^2 \left[A_0 - \frac{1}{3}\bar{q}^2 + \frac{1}{5}\bar{q}^4\right] - N_4 \bar{\Delta}^4 \left[\frac{1}{4} - \frac{\alpha}{2}\bar{q}^2\right] + \frac{1}{8} N_6 \bar{\Delta}^6 \quad (20)$$

where we have set $\alpha = \frac{\beta+2}{3}$ (for the simple plane wave considered in equation (8), we had $\alpha = 1$).

We proceed now as we have done for equation (8). Minimizing F with respect to $\bar{q}^2$ we find for the extremum the condition $\bar{q}^2 = \frac{5}{6} - \frac{5}{4}\alpha(N_4/N_2)\bar{\Delta}^2$, which implies that, in our considerations, we have for $\bar{\Delta}^2$ an upper bound $\bar{\Delta}^2_{max} = (2/3\alpha)N_2/N_4$. This leads, for the value of the free energy F at this extremum, to:

$$\frac{F}{\bar{\Delta}^2} = N_2 \left(A_0 - \frac{5}{36}\right) + N_4 \bar{\Delta}^2 \left(\frac{5\alpha}{12} - \frac{1}{4}\right) + \bar{\Delta}^4 \left(\frac{N_6}{8} - \frac{5\alpha^2}{16}\frac{N_4^2}{N_2}\right). \quad (21)$$

Now the standard FFLO solution corresponds to $A_0 = \frac{5}{36}$. Since we are interested in a better solution we want $A_0 > \frac{5}{36}$ which makes the first term of $F/\bar{\Delta}^2$ positive. On the other hand, for $\bar{\Delta} = \bar{\Delta}_{max}$, the sum of the last two terms in the right hand side (r.h.s.) of equation (21) can be written as $\bar{\Delta}^2_{max}(N_4/24\alpha)[5(\alpha - \frac{3}{5})^2 + 2N_2N_6/N_4^2 - \frac{9}{5}]$. This is always positive since we have $N_2N_6/N_4^2 \geq 1$ (this results directly from $\int \mathrm{d}\mathbf{r}|\bar{\Delta}|^2 \cdot \int \mathrm{d}\mathbf{r}|\bar{\Delta}|^6 \geq [\int \mathrm{d}\mathbf{r}|\bar{\Delta}|^4]^2$). If we assume that the second term in the r.h.s. of equation (21) is positive, this implies that the free energy is always positive. Therefore if we want to find non positive values for F it is necessary to have a negative coefficient for the second term in the r.h.s. of equation (21), which means $\alpha < \frac{3}{5}$. This is possible since the minimum $\beta = -\frac{1}{3}$ we have found above corresponds to a minimum $\alpha = \frac{5}{9}$.

Then the quadratic form equation (21) can be zero if we meet the condition $4(A_0 - \frac{5}{36})(2\frac{N_2N_6}{N_4^2} - 5\alpha^2) \leq (\frac{5\alpha}{3} - 1)^2$. This leads to the following result for the transition line to the FFLO phase:

$$A_0 = \frac{5}{36} + \frac{1}{8} \frac{\left(1 - \frac{5\alpha}{3}\right)^2}{\frac{N_2N_6}{N_4^2} - \frac{5}{2}\alpha^2}. \quad (22)$$

In the $(\bar{\mu} - T)$ plane this line is higher than the standard second order FFLO transition line, which is given by $A_0 = \frac{5}{36}$. On the other hand the value of $\bar{\Delta}_m$ which gives $F = 0$ at the threshold given by equation (21) is:

$$\bar{\Delta}_m^2 = \frac{N_2}{N_4} \frac{1 - \frac{5\alpha}{3}}{\frac{N_2N_6}{N_4^2} - \frac{5}{2}\alpha^2} \quad (23)$$

which is clearly nonzero and our transition is quite explicitely a first order transition (note that the condition $\bar{\Delta}_m < \bar{\Delta}_{max}$ is necessarily satisfied since F is zero for $\bar{\Delta}_m$ and positive for $\bar{\Delta}_{max}$).

Coming back to the location of the transition line equation (23) we consider now how to optimize it. First we see from the numerator that it is advantageous to lower α as much as possible. Indeed our minimum $\alpha = \frac{5}{9}$ is quite close to the limiting value $\alpha = \frac{3}{5}$ so the variation of the denominator with α is irrelevant. Hence we are lead to make the fourth order term in the free energy equation (9) as negative as possible by minimizing β, as we anticipated at the beginning of Section 4. Once we have taken $\alpha = \frac{5}{9}$, we see that it is of interest to take N_2N_6/N_4^2 as small as possible (we have seen that it is bounded from below by 1). From their definitions equations (18, 19) we can evaluate N_4 and N_6 for a general order parameter equation (11) $\bar{\Delta}(\mathbf{r}) = \sum \Delta_{\mathbf{q}_i} \exp(\mathrm{i}\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}) = 2\sum |\Delta_{\mathbf{q}_i}| \cos(\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r} + \varphi_{\mathbf{q}_i})$. One finds:

$$N_4\bar{\Delta}^4 = 3\left(\sum_i |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^2\right)^2 - 3\sum_i |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^4 \qquad (24)$$

and:

$$N_6\bar{\Delta}^6 = 15\left(\sum_i |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^2\right)^3 - 45\left(\sum_i |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^2\right)^2 \sum_i |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^4 + 40\sum_i |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^6. \qquad (25)$$

Actually one can recognize that, for symmetry reasons, the results involve only $\sum_i |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^n$ with $n = 2, 4, 6$, because odd powers of cosines average to zero. Hence the results assume necessarily the general form given by equations (24, 25). Then the coefficients are easily obtained from the specific case where all the amplitudes $|\Delta_{\mathbf{q}_i}|$ are equal.

Since the wavevectors are paired it is now more convenient to sum over pairs from now on. Defining $a_i = |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^2 / \sum_i |\Delta_{\mathbf{q}_i}|^2$ (implying $\sum_i a_i = 1$) we have:

$$\frac{9}{10} N_2N_6/N_4^2 = \frac{6 - 9S_2 + 4S_3}{(2 - S_2)^2} \qquad (26)$$

where $S_2 = \sum_i a_i^2$ and $S_3 = \sum_i a_i^3$. When we have a single pair $S_2 = S_3 = 1$ and the r.h.s. of equation (26) is equal to 1. We show now that it is otherwise larger than 1. Since $(2 - S_2)^2 < 4 - 3S_2$ because $S_2 < 1$ when we have more than a single pair, it is enough to prove that $3(1 - S_2) \geq 2(1 - S_3)$. This is in turn verified because we can write for the left-hand side $1 - S_2 = (\sum_i a_i)^2 - \sum_i a_i^2 = 2\sum_{i<j} a_i a_j$. In a similar way we have in the right-hand side $1 - S_3 = (\sum_i a_i)^3 - \sum_i a_i^3 = 3\sum_{i<j} a_i a_j (a_i + a_j) + 6\sum_{i<j<k} a_i a_j a_k = 3\sum_{i<j} a_i a_j - 9\sum_{i<j<k} a_i a_j a_k$. So our statement is correct since it is just equivalent to $\sum_{i<j<k} a_i a_j a_k \geq 0$ (the equality holds when we have only two pairs since one can not have three different indices). Therefore we come to the conclusion that N_2N_6/N_4^2 is minimized when we take a single pair of plane waves with wavevectors $(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$, corresponding to a simple order parameter proportional to $\cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$, which has hence a planar symmetry. It is unfavourable to increase the number of plane waves. This is more easily seen in the particular situation where these N plane waves have the same amplitude. In this case we merely have $N_2N_6/N_4^2 = [15N^2 - 45N + 40]/9(N-1)^2$ which increases regularly with increasing N, and is minimum for $N = 2$. In this last case $N_2N_6/N_4^2 = \frac{10}{9}$. It is interesting to remark that this conclusion is opposite to what one would obtain by considering the fourth order term alone in equation (9) and omitting the sixth order one. Since the fourth order term grows (compared to the second order one) with the number N plane waves, one would conclude that it is better to increase this number. The opposite turns out to be true because the sixth order term grows even faster with the number of plane waves. This shows quite clearly that, in contrast with what one might hope, the consideration of the fourth order term is not enough to conclude about the actual ground state of system.

We find then explicitely $A_0 = \frac{5}{36} + 2.02 \times 10^{-3}$. We note that this is quite close to the standard FFLO transition itself. For comparison the standard Clogston-Chandrasekhar [21,22] first order transition is given, as we have seen, by $A_0 = \frac{1}{8}$ so the difference with the standard FFLO transition is -1.39×10^{-2} which is also rather small. Since we know that the standard Clogston-Chandrasekhar transition and standard FFLO transition stay close beyond the vicinity of the TCP and that this proximity between these two lines extends down to zero temperature, it seems quite possible that the same is true for our first order transition line. This is indeed what has been found numerically by Matsuo *et al.* [14]. Hence it is very tempting to conclude from this proximity between first and second order lines that the first order transition is only very weakly first order. Naturally this point is very important experimentally since it would be quite difficult to distinguish between a second order transition and a very weak first order one.

On the other hand we know from the work of Burkhardt and Rainer [15] that the transition is second order in a 2D situation. So it is of some interest to consider formally an arbitrary dimension to see how one goes from the 2D to the 3D situation. For the case of our planar order parameter, there is no difficulty in working with an arbitrary dimension D. As we have mentionned at the end of Section 2, one has just to modify some coefficients in equation (7): here one has to multiply the Q^2 terms by $3/D$ and the Q^4 terms by $15/D(D+2)$. Reproducing then the above analysis, we obtain that the FFLO transition occurs for $A_0 = \frac{D+2}{12D}$ with a wavevector $\bar{q}^2 = \frac{D+2}{6}$. One finds again that, in order to obtain a phase transition higher than FFLO, the coefficient of the second term in the r.h.s. of equation (21) has to be negative. But this coefficient is now in general $N_4(\frac{\alpha(D+2)}{D} - 1)/4$ with explicitely $\alpha = \frac{5}{9}$. So we find $D_c = 2.5$ as the critical dimension to have a first order transition. The result equation (21) for

the location of the transition for this planar state becomes:

$$A_0 = \frac{D+2}{12D} + \frac{(2D-5)^2}{15D(7D-10)} \tag{27}$$

with the value of $\bar{\Delta}_m$ of $\bar{\Delta}$ at the threshold given by:

$$\bar{\Delta}_m^2 = \frac{4}{5}\,\frac{2D-5}{7D-10}. \tag{28}$$

Since we have found a critical dimension $D_c = 2.5$ which is halfway between the physical situations $D = 2$ and $D = 3$, from this point of view, the first order transition we have found is not 'very near to be second order', in contrast to what we suggested above. Naturally the best way to conclude on this point is to look at the value of the order parameter at the first order transition equation (28) which is $\bar{\Delta}_m \simeq 0.27$. Although this is clearly smaller than the corresponding value $\bar{\Delta}_m = 1$ for the uniform BCS state, the order of magnitude is similar so the first order transition is not very weak in this respect. This seems in agreement with results given in reference [14] where the jump of the order parameter is also sizeable.

In two dimensions we can again make use of equation (20) to compare all the possible states. As we have seen the transition is second order and we can neglect the sixth order term as in the original LO analysis. The fourth order term is positive and, roughly speaking, below the transition the state with smaller fourth order term is selected. This leads to take $N_4/N_2^2 = 3(2-S_2)/2$ as small as possible. So we find again that the single pair state $N = 2$ is selected, which corresponds to the state investigated by Burkhardt and Rainer [15].

In closing this section, let us note that we have have found a non- degenerate minimum for the free energy, namely the planar state $\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$ corresponding to two plane waves with opposite wavevectors and equal amplitude in equation (11). However by adding to this order parameter another cosine with a small amplitude, namely $\epsilon\cos(\mathbf{q_1}\cdot\mathbf{r})$, we can have a free energy arbitrarily close to the planar state free energy. Conversely the location for the transition can be made arbitrarily close to the planar state transition. These states are highly degenerate since the relative directions of $\mathbf{q}$ and $\mathbf{q_1}$ do not matter. These are some kind of excited states for our system with arbitrarily small energy and it is possible to speculate that they play a role in the physics of our system.

5 Beyond the LO subspace

In the preceding section we have restricted to the LO subspace our search for the state with lowest free energy at the transition and therefore with highest critical temperature. While this restriction is justified when the free energy expansion is limited to the fourth order term (this term being treated as a perturbation), it is no longer valid when the sixth order term is included. And indeed the actual minimum state does not belong to the LO subspace, since it can be checked that equation (11) can not satisfy the Euler-Lagrange equation corresponding to equation (10) because of the non linear terms. However we have found in the preceding section a non degenerate minimum corresponding to the planar state. The selection of the wavevectors of this state was due to the fourth order term while the number of components was controlled by the sixth order one, which is otherwise quite structureless. If the nonlinearities produce only a rather small change on the solution, it is reasonable to look for the actual solution as being 'near' the solution $\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$ we have found in Section 4. In particular it is reasonable to look for an order parameter with a one-dimensional dependence on $\mathbf{r}$ and we will also assume it to be real. And indeed we will find a solution which is quite near $\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$. Although this argumentation is only a self-consistent one (we can not exclude that a strong nonlinear modification of a three-dimensional solution produces the actual minimum), we note that the numerical exploration of Houzet *et al.* [13] has indeed produced a real one-dimensional order parameter for the minimum. We remark also that there is an analytical solution [23] in the case of one-dimensional space for this one-dimensional order parameter.

With a one-dimensional real order parameter the reduced free energy simplifies into:

$$F = \int \mathrm{d}x\,\left[A_0\bar{\Delta}^2 - \frac{1}{3}\bar{\Delta}'^2 + \frac{1}{5}\bar{\Delta}''^2\right] - \int \mathrm{d}x\,\left[\frac{1}{4}\bar{\Delta}^4 - \frac{5}{6}\bar{\Delta}^2\bar{\Delta}'^2\right] + \frac{1}{8}\int \mathrm{d}x\,\bar{\Delta}^6 \tag{29}$$

where $\bar{\Delta}'$ and $\bar{\Delta}''$ are first and second derivative of $\bar{\Delta}$ with respect to x. Although we deal with a nonlinear problem we can still minimize with respect to the amplitude of the order parameter, just as we have done at the end of the preceding section (this works actually also for a three-dimensional order parameter). We set $\bar{\Delta}(x) = a\delta(x)$, where $\delta(x)$ is a normalized spatial function (for example by $\int \delta^2 = 1$). $\delta(x)$ gives the shape of the order parameter while a corresponds to its amplitude. When we substitute in equation (29) we obtain for F/a^2 a quadratic form in a^2. Writing again that, for a specific function $\delta(x)$, this form has double root at the transition leads us to an expression for A_0 which does not depend anymore on the normalization of δ:

$$A_0 = \frac{[\int \delta^4 - \frac{10}{3}(\delta\delta')^2]^2}{8\int\delta^2\int\delta^6} + \frac{\int \frac{1}{3}\delta'^2 - \frac{1}{5}\delta''^2}{\int\delta^2} \tag{30}$$

and we want now to maximize $\mathrm{A_0}$. Similarly the condition that the free energy is zero at the transition imply:

$$\int \bar{\Delta}^6 = \int \bar{\Delta}^4 - \frac{10}{3}\bar{\Delta}^2\bar{\Delta}'^2 \tag{31}$$

or equivalently:

$$A_0\int\bar{\Delta}^2 = \int \frac{1}{8}\bar{\Delta}^6 + \frac{1}{3}\bar{\Delta}'^2 - \frac{1}{5}\bar{\Delta}''^2 \tag{32}$$

which gives the amplitude of the order parameter.

The condition that A_0 is maximum can be obtained from equation (30) but it is easier to deduce it from equation (29). One finds the ordinary nonlinear differential equation:

$$\frac{1}{5}\bar{\Delta}'''' + \left(\frac{1}{3} - \frac{5}{6}\bar{\Delta}^2\right)\bar{\Delta}'' - \frac{5}{6}\bar{\Delta}\bar{\Delta}'^2 + \frac{3}{8}\bar{\Delta}^5 - \frac{1}{2}\bar{\Delta}^3 + A_0\bar{\Delta} = 0 \tag{33}$$

(analytically this equation can be integrated once and then reduced to a second order nonlinear differential equation but this is of no real help for numerics). One checks readily that the cosine form of the order parameter $\bar{\Delta}(x) = a\cos(\bar{q}x)$ is not a solution. It satisfies only the linear part of the equation, which leads to $A_0 = \bar{q}^2/3 - \bar{q}^4/5$. Looking for the maximum of A_0 gives the FFLO result $A_0 = 5/36 \simeq 0.1389$ with $\bar{q}^2_{FFLO} = 5/6$. This FFLO solution corresponds to keep only the second term in the r.h.s. of equation (30). This term produces for A_0 a kind of (inverted) effective potential $\bar{q}^2/3 - \bar{q}^4/5$ which has a strong maximum for the FFLO solution. When we write a Fourier expansion of the solution this potential selects quite effectively the wavevectors in the close vicinity of the FFLO result $\bar{q}_{FFLO}$.

Indeed the numerical exploration of equation (33) for A_0 very close to the maximum gives for the solutions one or two basis frequencies q_0 and q_1 which are close to $\bar{q}_{FFLO}$. The other frequencies appearing in a Fourier analysis are simply odd combinations of q_0 and q_1 like $2q_0 \pm q_1$, $2q_1 \pm q_0$, $3q_0$, $4q_1 \pm q_0$, etc. The weights of these frequencies depend on their order, *i.e.* the higher the frequency, the smaller the weight. This shows explicitely the strength of the effective FFLO potential in A_0 (the second term in the r.h.s. of Eq. (30)). We have investigated analytically the efficiency of a small frequency splitting by writing $q_1 = q_0 + \epsilon$ with $\epsilon \to 0$ (but $\epsilon \neq 0$ because this limit is singular). However a single frequency $q_1 = q_0$ turned out to be always better. We are finally lead to the conclusion that going beyond the LO subspace produces only small corrections due to nonlinearities. These corrections correspond to odd harmonics of the fundamental frequency $\bar{q}$ and they are small because of the efficiency of the effective FFLO potential. Actually if we assume from the start that the corrections to $\delta_0(x) = \cos(\bar{q}x)$ are small, we can write $\delta(x) = \delta_0(x) + \delta_1(x)$, with $\delta_1(x)$ small, and perform a first order expansion of equation (30). One finds readily that it is most favorable to take $\delta_1(x)$ proportional to $\cos^3(\bar{q}x)$ (another contribution from $\cos^5(\bar{q}x)$ is quite small), but one has to go to second order to find the amplitude. Actually, once it is proved that this harmonic expansion is the correct answer, it is much easier to minimize equation (30) numerically which avoids cumbersome calculations. Specifically we considered the trial function $\delta(x) = \cos(\bar{q}x) + a_3\cos(3\bar{q}x + \phi_1) + a_5\cos(5\bar{q} + \phi_2)$ and numerically maximized A_0 (some more complete trial functions that we also tried eventually reduced to this form when maximized). We found $a_3 = -1.33 \times 10^{-2}$, $a_5 = 1.62 \times 10^{-4}$, $\bar{q} = 0.793$, $\phi_{1,2} = 0$ and $A_0 = 0.141604$ (which is in full agreement with reference [13]). This form is very close to the cosine solution and the improvement in A_0 compared to our result equation (22) for the cosine solution $A_0 = 31/220 \simeq 0.14091$ is pretty small in absolute values, although it gives a significant increase of 7×10^{-4} to our gain of 2.02×10^{-3} compared to the FFLO result. Our result $\bar{q} = 0.793$ has to be compared to our result in LO subspace from equation (23) $\bar{q} = 0.829$ and to $\bar{q}_{FFLO} = 0.913$.

Let us finally indicate that, in contrast to the weak nonlinearities we have just found at the transition, one finds that higher order harmonics become increasingly important when one goes deeper into the superfluid, which corresponds to decrease A_0. This makes this regime beyond the scope of our study. Actually it has been found quite interestingly that, in 2D [15] and in 3D [13], one goes progressively to a lattice of solitons, which leads to a second order phase transition to the uniform BCS state deep in the superfluid phase.

6 Conclusion

In this paper we have explored analytically the nature of the transition to the FFLO superfluid phases in the vicinity of the tricritical point, where these phases begin to appear. This region is convenient for the analytical study we make because, in the vicinity of this point, one can make use of an expansion of the free energy up to sixth order, both in order parameter amplitude and in wavevector. Despite this simplification one has still a complex nonlinear problem to solve. We have first explored the minimization of this free energy within the LO subspace, made of arbitrary superpositions of plane waves. We have seen that the standard second order FFLO phase transition is unstable and that a first order transition occurs at higher temperature. Within this subspace we have shown that it is favorable to have a real order parameter. Then among these states we have shown that those with the smallest number of plane waves are preferred. This leads to retain only two plane waves, corresponding to an order parameter with a $\cos(\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r})$ dependence, in agreement with preceding work [13]. Finally we have shown that, when releasing the constraint of working within the LO subspace, the order parameter at the transition is only very slightly modified by higher harmonics contributions and we have been able to ascribe this result to the strong selection of the wavevector caused by the second order terms of the free energy, corresponding physically to the standard FFLO transition.

We are very grateful to X. Leyronas for stimulating discussions and to K. Nagai for making us aware of his work, during a meeting very nicely organized by G. Eska and H. Brandt for D. Rainer's 60th anniversary.

References

1. P. Fulde, R.A. Ferrell, Phys. Rev. A **135**, 550 (1964)
2. A.I. Larkin, Y.N. Ovchinnikov, ZhETF **47**, 1136 (1964) [Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965)]
3. J. Singleton, J.A. Symington, M.S. Nam, A. Ardavan, M. Kurmoo, P. Day, J. Phys. Cond. Matt. **12**, L641 (2000)

4. K. Gloos *et al.*, Phys. Rev. Lett. **70**, 501 (1993)
5. B. DeMarco, D.S. Jin, Science **285**, 1703 (1999)
6. A.G. Truscott *et al.*, Science **291**, 2570 (2001)
7. F. Schreck *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 080403 (2001)
8. H.T.C. Stoof, M. Houbiers, C.A. Sackett, R.G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **76**, 10 (1996)
9. R. Combescot, Phys. Rev. Lett. **83**, 3766 (1999)
10. M.A. Baranov, M.Yu. Kagan, Yu. Kagan, JETP Lett. **64**, 301 (1996)
11. R. Combescot, Europhys. Lett. **55**, 150 (2001)
12. J.A. Bowers, K. Rajagopal, `hep-ph/0204079` and references therein
13. M. Houzet, Y. Meurdesoif, O. Coste, A.I. Buzdin, Physica C **316**, 89 (1999)
14. S. Matsuo, S. Higashitani, Y. Nagato, K. Nagai, J. Phys. Soc. Jpn **67**, 280 (1998)
15. H. Burkhardt, D. Rainer, Ann. Physik **3**, 181 (1994)
16. A.I. Buzdin, H. Kachkachi, Phys. Lett. A **225**, 341 (1997)
17. A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, I.E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice-Hall, 1963)
18. G. Eilenberger, Z. Phys. **182**, 427 (1965)
19. L.P. Gorkov, ZhETF **36**, 1918 (1959) [Sov. Phys. JETP **9**, 1364 (1959)]
20. Actually this is only correct for the generic situation where the $\{\mathbf{q}_i\}$ have no other specific relation than being associated in pairs $(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i)$. A simple case where additional degeneracy occurs is the set of 8 wavectors $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)/\sqrt{3}$, which has a cubic symmetry. In this case we find for example $N_4 = 216$ instead of 168. The same caveat is valid for equations (24, 25) below. However we will see quite generally that it is unfavorable to increase the number of plane waves in order to minimize the free energy. Since these exceptional cases imply a large number of plane waves, they should have higher free energy and we do not expect them to alter our final result
21. A.M. Clogston, Phys. Rev. Lett. **9**, 266 (1962)
22. B.S. Chandrasekhar, Appl. Phys. Lett. **1**, 7 (1962)
23. A.I. Buzdin, V.V. Tugushev, Sov. Phys. JETP **58**, 428 (1983); K. Machida, H. Nakanishi, Phys. Rev. B **30**, 122 (1984)

Publication II

Extension of Bogoliubov theory to quasicondensates

PHYSICAL REVIEW A **67**, 053615 (2003)

Extension of Bogoliubov theory to quasicondensates

Christophe Mora
Laboratoire de Physique Statistique, École Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 5, France

Yvan Castin
Laboratoire Kastler Brossel, École Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 5, France

(Received 20 December 2002; published 30 May 2003)

We present an extension of the well-known Bogoliubov theory to treat low-dimensional degenerate Bose gases in the limit of weak interactions and low density fluctuations. We use a density-phase representation and show that a precise definition of the phase operator requires a space discretization in cells of size *l*. We perform a systematic expansion of the Hamiltonian in terms of two small parameters, the relative density fluctuations inside a cell and the phase change over a cell. The resulting macroscopic observables can be computed in one, two, and three dimensions with no ultraviolet or infrared divergence. Furthermore, this approach exactly matches Bogoliubov's approach when there is a true condensate. We give the resulting expressions for the equation of state of the gas, the ground state energy, and the first order and second order correlation functions of the field. Explicit calculations are done for homogeneous systems.

DOI: 10.1103/PhysRevA.67.053615 PACS number(s): 03.75.Hh

INTRODUCTION

Recent progress in the realization of low-dimensional Bose gases in the quantum degenerate regime offers new perspectives for comparison with theoretical treatments. In atomic Bose gases, low-dimensional systems are achieved by creating anisotropic trapping potentials. Bose-Einstein condensates of reduced dimensionality, that is, with the atomic motion frozen in the harmonic oscillator ground state along one or two directions, have been produced [1,2].

Low-dimensional Bose gases with repulsive interactions were the subject of early theoretical studies. In the thermodynamic limit for spatially homogeneous systems, the Mermin-Wagner-Hohenberg theorem [3,4] excludes the formation of a Bose-Einstein condensate at finite temperature. This is physically due to large phase fluctuations which restrict the coherence length of the bosonic field to a finite value. One expects, however, that strong enough repulsive interactions between the particles strongly reduce the density fluctuations of the gas in contrast to the noninteracting case [5,6]. In this context, Popov introduced a long time ago the concept of a *quasicondensate* [7]. This concept has been extended to trapped gases [8–10]. The recent observation of large phase fluctuations for a degenerate Bose gas in a highly anisotropic cigar shaped trap has brought qualitative experimental confirmation of the theory in a quasi-one-dimensional geometry [11,12].

It turns out that the theory of quasicondensates has not yet reached the maturity of the theory for condensates. In the case of regular three-dimensional (3D) Bose-Einstein condensation in the weakly interacting regime, the Bogoliubov theory [13], based on a systematic expansion in a small parameter, gives a very precise description of the state of the gas. The intuitive idea of the Bogoliubov theory is to use the existence of a single macroscopically occupied mode ϕ_0 of the field, the mode of the condensate. We recall here the U(1)-symmetry preserving version of the theory [14,15]. One first splits the bosonic field operator as $\hat{\psi}=\phi_0\hat{a}_0+\delta\hat{\psi}$, where $\hat{a}_0$ annihilates a particle in the condensate mode and $\delta\hat{\psi}$ accounts for quantum and thermal fluctuations in the other modes. Then one uses the assumption $|\delta\hat{\psi}|\ll|\hat{a}_0|$ to solve the field equations of motion perturbatively. This approach is not suitable for a quasicondensate as there is no single macroscopically occupied field mode. Fortunately, in the case of weak density fluctuations, the Bogoliubov idea can still be adapted in a quantum phase-density representation of the field operator. One writes the field operator $\hat{\psi}$ as $\exp(i\hat{\theta})\hat{\rho}^{1/2}$ where $\hat{\theta}$ and $\hat{\rho}$ are position dependent operators, giving the phase and the density. One then splits the operator giving the density as $\rho_0+\delta\hat{\rho}$, where ρ_0 is a *c* number and $\delta\hat{\rho}$ are fluctuations, and one uses the fact that $|\delta\hat{\rho}|\ll\rho_0$. This idea has already been used in the literature [16] but to our knowledge without a precise definition of the phase operator, a well-known delicate point of quantum field theory [17,18]. As a consequence of the nonrigorous definition of the phase, divergences appear in the theory [16]: one has to introduce an arbitrary energy cutoff, so that predictions in 1D at zero temperature are made within a logarithmic accuracy only, and in 3D there is no full equivalence with the Bogoliubov theory. Another approach based on the current-density operator rather than on the phase operator was given by Schwartz [19]: an expansion of the Hamiltonian in terms of weak density and current fluctuations is performed relating the correlation function of the field to the static structure factor. It is subject to the same divergence problem in 2D and 3D in the absence of an energy cutoff if one calculates the structure factor in the Bogoliubov approximation.

A possibility to circumvent these difficulties is to rely on the path integral formulation of quantum field theory, which involves a functional integral over a classical field, for which the phase is perfectly well defined. This is the approach used by Popov, but with the introduction of an energy cutoff much smaller than the chemical potential of the gas, so that the physics at length scales smaller than the healing length is not

 ©2003 The American Physical Society

accurately described. This functional integral has recently been considered: it can lead to a cutoff independent formalism for quasicondensates [20,21] and it reproduces the same results as the Bogoliubov theory for a 3D condensate [22].

In this paper, we propose an improved Bogoliubov approach to treat quasicondensates in the phase-density formalism for a weakly interacting Bose gas. This approach is based on a lattice model, that is, with discrete spatial modes, which allows us to give a careful definition of the phase operator of the field and to introduce from the start an energy cutoff. It uses a systematic expansion in powers of the density fluctuations and of the spatial phase gradient and leads to simple expressions for the first and second order spatial correlation functions of the bosonic field that do not depend on the energy cutoff and that exactly reproduce in 3D the predictions of the Bogoliubov theory. We also use this formalism to determine the equation of state of the gas to the lowest nonvanishing order in the thermal and quantum excitations.

In Sec. I, we construct a discretized space model in order to define in a precise way the operators giving the phase and the density. We give the physical implications of the space discretization, restricting this approach to highly degenerate and weakly interacting Bose systems. In Sec. II, we derive a quadratic approximation to the Hamiltonian, that is, we derive approximate linear equations of motion for the density fluctuations and the phase operators. We recover to the lowest order the Gross-Pitaevskii equation for the quasicondensate density and we recover the Bogoliubov spectrum for the excitations. We also push the expansion to the next order, by producing a cubic correction to the quadratic Hamiltonian, including the interaction between the quasicondensate and the excitations. We show that inclusion of this correction is necessary to get a consistent theory and to establish the full equivalence between our approach and the number conserving Bogoliubov theory. In Sec. III, we present a few applications of our formalism: we give general formulas for the equation of state and the ground state of the gas, and for the first and second order correlation functions g_1 and g_2 of the field operator. In Sec. IV, we apply our formal results to the homogeneous Bose gas in various dimensions of space. This allows us to derive simply the validity condition of the method and to compare our results with existing results in the literature.

I. CONSTRUCTION OF A DISCRETE PHASE-DENSITY REPRESENTATION

A. Why discretize the real space?

In previous studies of quasicondensates the basic tools of the theory are an operator

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\,\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{1}$$

giving the density in $\mathbf{r}$ and an operator $\hat{\theta}(\mathbf{r})$ giving the phase of $\hat{\psi}(\mathbf{r})$, the field operator in $\mathbf{r}$, the position $\mathbf{r}$ being a continuous variable [23]. A small parameter of the theory characterizing the regime of quasicondensates is then that the density fluctuations, that is, the fluctuations of $\hat{\rho}(\mathbf{r})$, are small in relative values:

$$\mathrm{var}[\hat{\rho}(\mathbf{r})] \equiv \langle \hat{\rho}(\mathbf{r})^2 \rangle - \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle^2 \ll \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle^2. \tag{2}$$

However, one finds that the expectation value of $\hat{\rho}(\mathbf{r})^2$ is infinite at every point with a nonvanishing mean density $\rho(\mathbf{r}) = \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle$:

$$\langle \hat{\rho}(\mathbf{r})^2 \rangle = \delta(\mathbf{0})\,\rho(\mathbf{r}) + \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\,\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\,\hat{\psi}(\mathbf{r})\,\hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle, \tag{3}$$

where $\delta(\mathbf{0})$, the value of the Dirac distribution at the origin, is infinite, and the second term on the right-hand side, giving the probability density of finding two atoms at the same point of space, is finite in any realistic model. Mathematically, this divergence is due to the use of the bosonic commutation relations of the field operators $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ and $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ at the same point of space to put the atomic field product in normal order.

In order to have small, and therefore finite, density fluctuations, one is forced to discretize the space, that is, to collect the particles in little boxes at the nodes of a spatial grid. Each little box has equal length l along each dimension of space and is parametrized by the position $\mathbf{r}$ of its center. The field operator $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ has the effect of removing a particle in the box at position $\mathbf{r}$ and it now satisfies the bosonic commutation relations

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{l^D}, \tag{4}$$

where $\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}$ is the discrete Kronecker delta function and D is the dimension of space. The variance of the operator giving the density is now finite:

$$\mathrm{var}[\hat{\rho}(\mathbf{r})] = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\,\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\,\hat{\psi}(\mathbf{r})\,\hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle - \rho^2(\mathbf{r}) + \frac{\rho(\mathbf{r})}{l^D}. \tag{5}$$

In the validity domain of the theoretical approach of this paper, this variance will be much smaller than $\rho^2(\mathbf{r})$ because both the sum of the first two terms and the last term in the right-hand side are small:

$$\left| \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\,\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\,\hat{\psi}(\mathbf{r})\,\hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle - \rho^2(\mathbf{r}) \right| \ll \rho^2(\mathbf{r}), \tag{6}$$

$$\rho(\mathbf{r})\,l^D \gg 1. \tag{7}$$

B. The phase operator

In the usual continuous space theories, a Hermitian field phase operator $\hat{\theta}(\mathbf{r})$ is introduced subject to the following commutation relation with the operator giving the density:

$$[\hat{\rho}(\mathbf{r}), \hat{\theta}(\mathbf{r}')] = i\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{8}$$

In our discrete model the desired commutation relation is modified into

$$[\hat{\rho}(\mathbf{r}),\hat{\theta}(\mathbf{r}')]=i\frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{l^D}. \tag{9}$$

First we recall briefly that there actually exists no Hermitian operator $\hat{\theta}(\mathbf{r})$ satisfying strictly the above commutation relation. From the identity (9) one can indeed show that the operator

$$T(\alpha)\equiv e^{-i\alpha\hat{\theta}(\mathbf{r})}, \tag{10}$$

where α is any real number, is a translation operator for the density [24]:

$$T(\alpha)^\dagger\hat{\rho}(\mathbf{r})T(\alpha)=\hat{\rho}(\mathbf{r})+\frac{\alpha}{l^D}. \tag{11}$$

This identity contradicts two fundamental properties of $\hat{\rho}(\mathbf{r})$, the positiveness and the discreteness of its spectrum [25].

We now proceed with the construction of a phase operator $\hat{\theta}(\mathbf{r})$ approximately satisfying the commutation relation (9). The key ingredients allowing such an approximate construction are (i) to be in the limit of a large occupation number of the considered box of the lattice, and (ii) to construct the operator $e^{i\hat{\theta}}$ first, which, according to Eq. (11) taken with $\alpha=-1$, simply reduces the number of particles in the considered box by 1.

In each spatial box we introduce the basis of Fock states $|n,\mathbf{r}\rangle$ with exactly n particles in the box. In this basis the field operators have the following matrix elements:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}')|n,\mathbf{r}\rangle=\frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{l^{D/2}}\sqrt{n}|n-1,\mathbf{r}\rangle,$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')|n,\mathbf{r}\rangle=\frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{l^{D/2}}\sqrt{n+1}|n+1,\mathbf{r}\rangle \tag{12}$$

as a consequence of the commutation relation (4). The atomic density $\hat{\rho}$ defined by $\hat{\rho}(\mathbf{r})=\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})$ is diagonal in the Fock state basis:

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}')|n,\mathbf{r}\rangle=\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\frac{n}{l^D}|n,\mathbf{r}\rangle. \tag{13}$$

We then introduce the operator $\hat{A}$ defined by

$$\hat{\psi}(\mathbf{r})\equiv\hat{A}(\mathbf{r})\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}. \tag{14}$$

In the Fock space $\hat{A}(\mathbf{r})$ reduces by 1 the number of particles n in the box $\mathbf{r}$:

$$\hat{A}(\mathbf{r}')|n,\mathbf{r}\rangle=(1-\delta_{n,0})\,\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}|n-1,\mathbf{r}\rangle. \tag{15}$$

Note that its action on the vacuum state of the box gives zero. For each box $\mathbf{r}$, the definition of $\hat{A}$ leads to the exact relations

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger=I,\quad \hat{A}^\dagger\hat{A}=I-|0\rangle\langle 0|,\quad \text{and}\quad [\hat{A},\hat{A}^\dagger]=|0\rangle\langle 0|, \tag{16}$$

where I is the identity operator and $|0\rangle$ is the zero-particle state or vacuum state in the box of center $\mathbf{r}$. We find that the operator $\hat{A}$ is almost unitary, i.e., it is effectively unitary for a physical state of the system with a negligible probability of having an empty box. In what follows, we assume that this condition is satisfied, so that the projector $|0\rangle\langle 0|$ can be neglected:

$$\text{occupation probability of } |n=0,\mathbf{r}\rangle \ll 1. \tag{17}$$

In this case, we write the approximately unitary operator $\hat{A}$ as

$$\hat{A}(\mathbf{r})\simeq e^{i\hat{\theta}(\mathbf{r})}\quad\text{with}\quad \hat{\theta}^\dagger(\mathbf{r})\simeq\hat{\theta}(\mathbf{r}), \tag{18}$$

which amounts to writing the field operator as

$$\hat{\psi}(\mathbf{r})\simeq e^{i\hat{\theta}(\mathbf{r})}\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}. \tag{19}$$

This should be understood as a formal writing, allowing us, for example, to recover the matrix elements of $\hat{A}$ and therefore of the field operator $\hat{\psi}$ from the commutation relation (9). We summarize below all the commutation relations of our phase-density representation:

$$[\hat{\rho}(\mathbf{r}),\hat{\theta}(\mathbf{r}')]\simeq\frac{i\,\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{l^D},\quad [\hat{\rho}(\mathbf{r}),\hat{\rho}(\mathbf{r}')]=0,$$

$$[\hat{\theta}(\mathbf{r}),\hat{\theta}(\mathbf{r}')]\simeq 0. \tag{20}$$

We come back to the constraint (17) at the basis of the construction of $\exp(i\hat{\theta})$. A sufficient condition to have a low probability for zero particle occupation in a box is obtained for a large mean number of particles in the box and with small relative particle number fluctuations. This is the regime that we wish to consider in this paper. We are therefore back to the discussion of the previous subsection and to the conditions (6),(7) for weak density fluctuations. In particular, the construction of the operator $\exp(i\hat{\theta})$ becomes problematic in the limit $l\to 0$, that is, in the continuous model.

C. How to choose the grid spacing *l*

Working on a grid can also be seen as performing a coarse-grain average over all physical quantities on a scale l. This averaging suppresses the short wavelength modes (shorter than l) and thus introduces an energy cutoff:

$$E_{\text{cut}}\simeq\frac{\hbar^2}{ml^2}. \tag{21}$$

This cutoff is of no physical consequence if all characteristic energies (μ, k_BT) are smaller, i.e., l is smaller than the corresponding characteristic lengths. This leads, for instance, to the following restrictions for l:

$$l<\xi \quad \text{and} \quad l<\lambda, \tag{22}$$

where

$$\xi=\frac{\hbar}{\sqrt{m\mu}} \tag{23}$$

is the healing length, and

$$\lambda=\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}} \tag{24}$$

is the thermal de Broglie wavelength. These two restrictions, combined with Eq. (7), impose

$$\rho\lambda^D\gg 1, \tag{25}$$

$$\rho\xi^D\gg 1. \tag{26}$$

These are conditions of validity for our discrete model.

The first one, Eq. (25), is the quantum degeneracy regime occurring at sufficiently low temperatures. The second restriction, Eq. (26), corresponds to the regime of weakly interacting systems. Its dependence on the density varies according to the dimension of space. In 1D and 3D, the mean field prediction for the chemical potential is $\mu\simeq g\rho$, where g is a constant characterizing the interaction potential, the so-called coupling constant. In 1D, Eq. (26) is the high-density limit where a mean field theory is valid; we recall that the small density limit $\rho\,\xi=\hbar\sqrt{\rho/mg}\ll 1$ corresponds to the strongly interacting (or strongly correlated) Tonks gas regime. In 3D, the effective coupling constant g is related to the s-wave scattering length a of the interaction potential, $g=4\pi\hbar^2a/m$, so that $\rho\xi^3\propto 1/\sqrt{\rho a^3}\gg 1$: one recovers the usual small gaseous parameter $\sqrt{\rho a^3}$. In 2D, the chemical potential scales as $\hbar^2\rho/[m\ln(1/\rho a^2)]$ where a is the scattering length of the 2D interaction potential, so that the condition $\rho\xi^2\gg 1$ results in a low-density condition, $\ln(1/\rho a^2)\gg 1$.

II. PERTURBATIVE TREATMENT OF A MODEL HAMILTONIAN

A. Model Hamiltonian

In our lattice model, we represent the binary interaction potential among the particles by a discrete δ potential:

$$V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)=\frac{g_0}{l^D}\delta_{\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2}, \tag{27}$$

where g_0 is the bare coupling constant. Note that g_0 in general differs from the effective coupling constant g, and we shall come back to this point in Sec. IV A. With this model potential, the grand canonical Hamiltonian is

$$H=\sum_{\mathbf{r}} l^D\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\Delta\hat{\psi}(\mathbf{r})+[U(\mathbf{r})-\mu]\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})+\frac{g_0}{2}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\right], \tag{28}$$

where $U(\mathbf{r})$ is an external trapping potential and where the Laplacian is a symmetric operator coupling the different neighboring boxes:

$$\Delta f(\mathbf{r})=\sum_j \frac{f(\mathbf{r}+l\mathbf{e}_j)+f(\mathbf{r}-l\mathbf{e}_j)-2f(\mathbf{r})}{l^2}. \tag{29}$$

The $\mathbf{e}_j$ are the unitary vectors and j the different orthogonal space directions (for example, $j=x,y,z$ in 3D). As usual we take periodic boundary conditions inside a rectangular box with lengths integer multiples of l.

We now rewrite the Hamiltonian in the density-phase representation, that is, in term of the operators $\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$ giving the density and the phase as defined in the previous section. The contributions of the trapping potential and of the interaction potential to the Hamiltonian are local in real space and therefore include the operator $\hat{\rho}$ only:

$$H_{\text{pot}}=\sum_{\mathbf{r}} l^D\hat{\rho}(\mathbf{r})\left[U(\mathbf{r})-\mu+\frac{g_0}{2}\left(\hat{\rho}(\mathbf{r})-\frac{1}{l^D}\right)\right], \tag{30}$$

where we have used the bosonic commutation relation (4) to exchange one of the $\hat{\psi}^\dagger$ with $\hat{\psi}$ in the interaction term. The kinetic energy term involves the phase operator explicitly:

$$H_{\text{kin}}=-\frac{\hbar^2}{2ml^2}\sum_{\mathbf{r}} l^D\sum_j \sqrt{\hat{\rho}}\left(e^{i(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})}\sqrt{\hat{\rho}_{+j}}+e^{i(\hat{\theta}_{-j}-\hat{\theta})}\sqrt{\hat{\rho}_{-j}}-2\sqrt{\hat{\rho}}\right), \tag{31}$$

where we have introduced the notation $\hat{\theta}_{\pm j}=\hat{\theta}(\mathbf{r}\pm l\mathbf{e}_j)$ and $\hat{\rho}_{\pm j}=\hat{\rho}(\mathbf{r}\pm l\mathbf{e}_j)$. A remarkable property of this formulation, to be used below, is that it involves only the difference of two phase operators between two neighboring points of the lattice.

B. Hamiltonian quadratization and cubization

We now expand the Hamiltonian to third order in powers of two small parameters. As already discussed in Sec. I A the regime of quasicondensates that we are interested in corresponds to small relative fluctuations $\delta\hat{\rho}$ of the density. In the zeroth order approach totally neglecting the density fluctuations, the density is set to a deterministic value ρ_0, as we shall see. The second order expansion allows us to describe the density fluctuations:

$$\hat{\rho}(\mathbf{r})=\rho_0(\mathbf{r})+\delta\hat{\rho}(\mathbf{r}). \tag{32}$$

The third order expansion allows us to calculate the mean value of $\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})$.

The first small parameter of the systematic expansion used in this paper is therefore given by

$$\epsilon_1 = \frac{|\delta\hat{\rho}|}{\rho_0} \ll 1, \tag{33}$$

where $|\delta\hat{\rho}|$ is the typical value of the operator $\delta\hat{\rho}$ in the physical state of the system. Mathematically, this allows us to expand $\sqrt{\hat{\rho}}$ as

$$\hat{\rho}^{1/2} = \rho_0^{1/2} + \frac{1}{2}\frac{\delta\hat{\rho}}{\rho_0^{1/2}} - \frac{1}{8}\frac{\delta\hat{\rho}^2}{\rho_0^{3/2}} + \frac{1}{16}\frac{\delta\hat{\rho}^3}{\rho_0^{5/2}} \cdots. \tag{34}$$

The second small parameter of the expansion is given by

$$\epsilon_2 = |l\nabla\hat{\theta}| \ll 1. \tag{35}$$

Here ∇ represents the gradient on the lattice:

$$\nabla f(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{f(\mathbf{r}+l\mathbf{e}_j) - f(\mathbf{r}-l\mathbf{e}_j)}{2l}\mathbf{e}_j, \tag{36}$$

where f is an arbitrary function. Physically, the existence of the small parameter ϵ_2 is reasonable: it is at the basis of our hypothesis that the continuous quantum field problem can be well approximated by a discrete lattice model, provided that l is small enough (see Sec. I C). Mathematically, this second small parameter allows us to expand the exponentials of the phase differences in Eq. (31):

$$e^{i(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta})} = 1 + i(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta}) - \frac{1}{2}(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta})^2 \cdots. \tag{37}$$

From the fact that the discretization length l is on the order of the smaller of the two macroscopic length scales ξ and λ [see Eq. (22)], it will be checked later that the parameters ϵ_1 and ϵ_2, though of apparently different physical origin, can be chosen to be of the same order of magnitude,

$$\epsilon_1 \sim \epsilon_2 \sim \frac{1}{\sqrt{\rho_0 l^D}}, \tag{38}$$

and can therefore be treated mathematically as infinitesimals of the same order. The mathematical details of the expansion

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + \cdots \tag{39}$$

are given in Appendix A; we present here only the results:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{r}} l^D \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\rho_0}\Delta\sqrt{\rho_0} + \frac{g_0}{2}\rho_0^2 + [U(\mathbf{r}) - \mu]\rho_0 \right],$$

$$H_1 = \sum_{\mathbf{r}} l^D \left[-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{\rho_0}}\Delta\sqrt{\rho_0} + U(\mathbf{r}) - \mu + g_0\rho_0 \right]\delta\hat{\rho},$$

$$H_2 = E_2[\rho_0] + \sum_{\mathbf{r}} l^D \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta\hat{\rho}}{2\sqrt{\rho_0}}\Delta\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{2\sqrt{\rho_0}}\right) + \frac{\hbar^2\delta\hat{\rho}^2}{8m\rho_0^{3/2}}\Delta\sqrt{\rho_0} + \frac{g_0}{2}\delta\hat{\rho}^2 + \frac{\hbar^2}{2m}\sum_j \sqrt{\rho_0(\mathbf{r})\rho_0(\mathbf{r}+l\mathbf{e}_j)}\frac{[\hat{\theta}(\mathbf{r}+l\mathbf{e}_j) - \hat{\theta}(\mathbf{r})]^2}{l^2} \right],$$

$$H_3 = -\frac{g_0}{2}\sum_{\mathbf{r}} \delta\hat{\rho} + \frac{\hbar^2}{4ml^2}\sum_{\mathbf{r},j} l^D(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta})\left(\frac{\rho_{0,+j}^{1/2}}{\rho_0^{1/2}}\delta\hat{\rho} + \frac{\rho_0^{1/2}}{\rho_{0,+j}^{1/2}}\delta\hat{\rho}_{+j}\right)(\hat{\theta}_{+j} - \hat{\theta}) + \frac{\hbar^2}{8m}\sum_{\mathbf{r}} \frac{\delta\hat{\rho}}{\rho_0}(\rho_0^{-1/2}\Delta\rho_0^{1/2} - \rho_0^{1/2}\Delta\rho_0^{-1/2})$$
$$- \frac{\hbar^2}{16m}\sum_{\mathbf{r}} l^D\left[\frac{\delta\hat{\rho}^3}{\rho_0^{5/2}}\Delta\sqrt{\rho_0} - \frac{\delta\hat{\rho}^2}{\rho_0^{3/2}}\Delta\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}\right)\right]. \tag{40}$$

The quantity E_2 in H_2 is a c-number functional of the density ρ_0, given in Appendix A, which therefore has no contribution to the dynamics of the quantum field.

C. Iterative solution for the quadratic Hamiltonian

We now solve perturbatively, order by order, the Hamiltonian problems defined by H_0, H_0+H_1, and $H_0+H_1+H_2$. To zeroth order in $\epsilon_{1,2}$, the Hamiltonian is a c number. As the chemical potential is fixed in our approach, H_0 is minimized for a density profile $\rho_0(\mathbf{r})$ such that $\sqrt{\rho_0}$ solves the discrete version of the Gross-Pitaevskii equation:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) - \mu + g_0\rho_0\right]\sqrt{\rho_0} = 0. \tag{41}$$

This density profile constitutes the zeroth order approxima-

tion to the density ρ. It contains a number of particles that we call N_0:

$$N_0 \equiv \sum_{\mathbf{r}} l^D \rho_0(\mathbf{r}). \tag{42}$$

Note that N_0 coincides with the mean total number of particles N only to lowest order in the theory. Equation (41) defines ρ_0 and therefore N_0 as functions of the chemical potential μ. It will, however, turn out to be more convenient to parametrize the theory in terms of N_0 rather than in terms of μ. We will therefore consider μ and ρ_0 as functions of N_0:

$$\mu = \mu_0(N_0), \tag{43}$$

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}; N_0). \tag{44}$$

μ_0 is therefore the Gross-Pitaevskii prediction for the chemical potential of a gas of N_0 particles.

For the choice of density profile (41), the first order correction H_1 to the Hamiltonian vanishes. We therefore now have to solve the Hamiltonian problem defined by H_2, in order to determine the lowest-order approximation to the density fluctuation $\delta\hat{\rho}$ and the phase $\hat{\theta}$. It is instructive to write the corresponding Heisenberg equations of motion, which are linear (and therefore trivially solvable) since H_2 is quadratic. As $\hat{\theta}$ and $\delta\hat{\rho}$ are two canonically conjugate variables, the equations of motion are

$$\begin{aligned}\hbar\partial_t\hat{\theta} &\simeq -\frac{1}{l^D}\frac{\partial H_2}{\partial\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})} = \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{\rho_0}}\left[\Delta\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{2\sqrt{\rho_0}}\right) - \delta\hat{\rho}\frac{\Delta\sqrt{\rho_0}}{2\rho_0}\right] \\ &\quad - g_0\delta\hat{\rho}, \\ \hbar\partial_t\delta\hat{\rho}(\mathbf{r}) &\simeq \frac{1}{l^D}\frac{\partial H_2}{\partial\hat{\theta}(\mathbf{r})} = -\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\rho_0}[\Delta(\hat{\theta}\sqrt{\rho_0}) - \hat{\theta}\Delta\sqrt{\rho_0}].\end{aligned} \tag{45}$$

An important difference of these equations from the so-called quantum hydrodynamics equations for $\delta\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$ is that our formalism keeps the so-called quantum pressure term for $\partial_t\hat{\theta}$, whereas it is usually neglected in the literature [23]. This allows our treatment to have a cutoff energy larger than μ, whereas the usual treatment is restricted to energy modes much below μ.

Furthermore, one can simplify these equations using the Gross-Pitaevskii equation (41) to eliminate $\Delta\sqrt{\rho_0}$:

$$\hbar\partial_t\hat{\theta} = -\frac{1}{2\sqrt{\rho_0}}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U + 3g_0\rho_0 - \mu\right]\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}\right), \tag{46}$$

$$\hbar\partial_t\delta\hat{\rho}(\mathbf{r}) = 2\sqrt{\rho_0}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U + g_0\rho_0 - \mu\right](\hat{\theta}\sqrt{\rho_0}). \tag{47}$$

This gives the idea of a very simple canonical transformation which, remarkably, maps our equations for a quasicondensate (46),(47) into the equations for the Bogoliubov modes of a condensate: the field

$$\hat{B} = \frac{\delta\hat{\rho}}{2\sqrt{\rho_0}} + i\sqrt{\rho_0}\hat{\theta} \tag{48}$$

has bosonic commutation relations

$$[\hat{B}(\mathbf{r}), \hat{B}^\dagger(\mathbf{r}')] = \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{l^D} \tag{49}$$

and it obeys the standard Bogoliubov equations

$$i\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\hat{B}\\ \hat{B}^\dagger\end{pmatrix} = \mathcal{L}_{\mathrm{GP}}\begin{pmatrix}\hat{B}\\ \hat{B}^\dagger\end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U - \mu + 2g_0\rho_0 & g_0\rho_0 \\ -g_0\rho_0 & -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U - \mu + 2g_0\rho_0\right)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{B}\\ \hat{B}^\dagger\end{pmatrix}. \tag{50}$$

This mapping can be readily extended to the Hamiltonian H_2, which is expected to be canonically equivalent to the Bogoliubov Hamiltonian:

$$\begin{aligned}H_2 = l^D\sum_{\mathbf{r}} &\hat{B}^\dagger\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U + g_0\rho_0 - \mu\right)\hat{B} \\ &+ g_0\rho_0\left[\hat{B}^\dagger\hat{B} + \frac{1}{2}(\hat{B}^2 + \hat{B}^{\dagger 2})\right].\end{aligned} \tag{51}$$

We have checked that the identity (51) indeed holds by replacing $\hat{B}$ by its expression (48) in terms of $\delta\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$, and by using the value of the commutators (20) and the fact that $\sqrt{\rho_0}$ solves the Gross-Pitaevskii equation. Remarkably, the energy functional $E_2[\rho_0]$ is exactly compensated by the contribution of the commutators.

This mapping therefore allows us to reuse the standard diagonalization of the Bogoliubov Hamiltonian. We recall here briefly the procedure described in [15,27]. One intro-

duces the normal eigenmodes (u_s, v_s) of the Bogoliubov operator $\mathcal{L}_{\rm GP}$ with an energy ϵ_s, normalizable as

$$\sum_{\mathbf{r}} l^D[|u_s(\mathbf{r})|^2 - |v_s(\mathbf{r})|^2] = 1. \tag{52}$$

Then (v_s^*, u_s^*) is an eigenmode of $\mathcal{L}_{\rm GP}$ with the energy $-\epsilon_s$. To form a complete family of vectors one has to further introduce the zero-energy mode of $\mathcal{L}_{\rm GP}$, given by $(\phi_0, -\phi_0)$, and the anomalous mode (ϕ_a, ϕ_a) with

$$\phi_0 = \sqrt{\rho_0/N_0} \quad \text{and} \quad \phi_a = \sqrt{N_0}\partial_{N_0}\sqrt{\rho_0}. \tag{53}$$

The corresponding normalization of the anomalous mode is such that the scalar product of ϕ_0 and ϕ_a is 1/2. With these definitions, one introduces the components of $(\hat{B}, \hat{B}^\dagger)$ on the zero-energy mode, on the anomalous mode and on the regular (u_s, v_s) modes:

$$\begin{pmatrix} \hat{B} \\ \hat{B}^\dagger \end{pmatrix} = -i\sqrt{N_0}\hat{Q}\begin{pmatrix} \phi_0 \\ -\phi_0 \end{pmatrix} + \frac{\hat{P}}{\sqrt{N_0}}\begin{pmatrix} \phi_a \\ \phi_a \end{pmatrix} + \sum_s \hat{b}_s \begin{pmatrix} u_s \\ v_s \end{pmatrix} + \hat{b}_s^\dagger \begin{pmatrix} v_s^* \\ u_s^* \end{pmatrix}. \tag{54}$$

$\hat{Q}$ is a collective coordinate representing the quantum phase of the field and $\hat{P}$ is its conjugate momentum

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = -i. \tag{55}$$

Physically $\hat{P}$ corresponds to fluctuations in the total number of particles, as expected, and as shown in more detail later [see Eq. (67)]. The operators $\hat{b}_s$ are bosonic annihilation operators with the usual commutation relations $[\hat{b}_s, \hat{b}_{s'}] = \delta_{s,s'}$. They commute with $\hat{P}$ and $\hat{Q}$. The inverse formulas giving $\hat{b}_s$, $\hat{Q}$, and $\hat{P}$ in terms of $\hat{B}$ can be found, for example, in [15]. Equation (54) results in the following modal expansion for the density fluctuations and the phase operators:

$$\hat{\theta}(\mathbf{r}) = \sum_s \theta_s(\mathbf{r})\hat{b}_s + \theta_s^*(\mathbf{r})\hat{b}_s^\dagger - \hat{Q},$$

$$\hat{\delta\rho}(\mathbf{r}) = \sum_s \delta\rho_s(\mathbf{r})\hat{b}_s + \delta\rho_s^*(\mathbf{r})\hat{b}_s^\dagger + \hat{P}\partial_{N_0}\rho_0, \tag{56}$$

where

$$\theta_s(\mathbf{r}) = \frac{u_s(\mathbf{r}) - v_s(\mathbf{r})}{2i\sqrt{\rho_0(\mathbf{r})}},$$

$$\delta\rho_s(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho_0(\mathbf{r})}[u_s(\mathbf{r}) + v_s(\mathbf{r})]. \tag{57}$$

By construction, this modal expansion, when inserted into the quadratic Hamiltonian H_2, results in

$$H = \sum_s \epsilon_s \hat{b}_s^\dagger \hat{b}_s + \frac{1}{2}\hat{P}^2\mu_0' + \tilde{E}_2[\rho_0], \tag{58}$$

where $\mu_0' = d\mu_0/dN_0$. This is the sum of uncoupled harmonic oscillators, plus a massive free degree of freedom corresponding to the unbound phase variable $\hat{Q}$. The effective mass of the phase variable is given by $1/\mu_0'$. The energy functional $\tilde{E}_2[\rho_0]$ will be calculated in Sec. III B, where it will be shown that it leads to exactly the same ground state energy as the number conserving Bogoliubov theory. This shows that the Bogoliubov theory can be used to calculate the ground state energy even for, e.g., 1D quasicondensates, a fact commonly used in the literature [28,29] but which looks rather heuristic in the absence of justification.

D. Effect of cubic Hamiltonian corrections on the density

The physics contained in the cubic term H_3 of the Hamiltonian is very rich. It includes interaction effects between the Bogoliubov modes of the previous section, allowing a generalization to quasicondensates of the theory of energy shifts and Beliaev-Landau damping usually put forward for Bose-Einstein condensates [30–32].

We are more modest here. Our motivation to include the cubic corrections is that the quadratic Hamiltonian H_2 brings actually no correction to the zeroth order approximation ρ_0 to the mean density, since the mean value of $\hat{\delta\rho}$ vanishes at the level of the second order theory. This is highly nonsatisfactory as it brings some inconsistency into the calculation of an observable like g_1, the first order correlation function of the field: to get a nontrivial prediction for g_1 one has to include terms quadratic in the phase operator, which are second order in ϵ_2, which forces us to also include second order corrections to the mean density, as will become very explicit in Sec. III.

We therefore calculate the first order correction to the equations of motion of $\hat{\delta\rho}$ and $\hat{\theta}$ due to the cubic Hamiltonian term H_3, and we take the average over the quantum state corresponding to the density operator at thermal equilibrium for the Hamiltonian H_2. This gives source terms to add to the equations for the mean density and phase derived from H_2. We leave the details of the calculations to Appendix B and give the result directly:

$$\hbar\partial_t\langle\hat{\delta\rho}\rangle_3 = \rho_0^{1/2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U + g_0\rho_0 - \mu\right](2\rho_0^{1/2}\langle\hat{\theta}\rangle_3), \tag{59}$$

$$\begin{aligned} -2\hbar\sqrt{\rho_0}\partial_t\langle\hat{\theta}\rangle_3 = &\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U + 3g_0\rho_0 - \mu\right] \\ &\times\left(\frac{\langle\hat{\delta\rho}\rangle_3 - \langle\hat{B}^\dagger\hat{B}\rangle_2}{\rho_0^{1/2}}\right) \\ &+ g_0\rho_0^{1/2}\langle 4\hat{B}^\dagger\hat{B} + \hat{B}^2 + B^{\dagger 2}\rangle_2 \\ &- 2\langle\hat{P}^2\rangle_2\mu_0'\partial_{N_0}\sqrt{\rho_0}, \end{aligned} \tag{60}$$

where the thermal average $\langle\cdots\rangle_2$ is taken with the unperturbed Hamiltonian H_2 and $\langle\cdots\rangle_3$ is taken with the perturbed Hamiltonian H_2+H_3 to first order in H_3. The expectation value of the ''kinetic energy'' of the unbound phase variable in Eq. (58) is equal to $k_BT/2$ according to the equipartition theorem so that

$$\langle\hat{P}^2\rangle_2=\frac{k_BT}{\mu_0'}. \tag{61}$$

At equilibrium the expectation values of $\partial_t\delta\hat{\rho}$ and $\partial_t\hat{\theta}$ vanish. This fact is obvious for $\partial_t\delta\hat{\rho}$; it is less obvious for $\partial_t\hat{\theta}$ because of the presence of the unbound variable $\hat{Q}$; we therefore produce a proof of that in Appendix C. We therefore have to solve Eqs. (59) and (60) with the left-hand side set to zero. The first equation (59) imposes the condition that the mean value of $\hat{\theta}$ is position independent, a trivial result. In the second equation, the operator acting on $\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3$ is strictly positive so that it is invertible, and Eq. (60) determines the correction to the mean density in a unique way.

We now go through a sequence of transformations allowing us to get a physical understanding of the value of $\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3$. The first step is to pull out the contribution of the ''anomalous'' terms $\hat{P}$, $\hat{Q}$ in the modal expansion (54):

$$\hat{B}(\mathbf{r})\equiv -i\sqrt{N_0}\hat{Q}\phi_0(\mathbf{r})+\frac{1}{\sqrt{N_0}}\hat{P}\phi_a(\mathbf{r})+\hat{B}_n. \tag{62}$$

We calculate the expectation values of Eq. (60) involving the operator $\hat{B}$, using the fact that all the crossed terms between the anomalous part and the operators b_s have a vanishing expectation value:

$$\langle\hat{B}^\dagger\hat{B}\rangle_2=\frac{\phi_a^2}{N_0}\langle\hat{P}^2\rangle_2+N_0\phi_0^2\langle\hat{Q}^2\rangle_2+\langle\hat{B}_n^\dagger\hat{B}_n\rangle_2-\phi_a\phi_0, \tag{63}$$

$$\langle\hat{B}^2\rangle_2+\langle\hat{B}^{\dagger 2}\rangle_2=2\frac{\phi_a^2}{N_0}\langle\hat{P}^2\rangle_2-2N_0\phi_0^2\langle\hat{Q}^2\rangle_2 +\langle\hat{B}_n^2\rangle_2+\langle\hat{B}_n^{\dagger 2}\rangle_2. \tag{64}$$

The term $\phi_0\phi_a$ in Eq. (63) comes from the noncommutation of $\hat{P}$ and $\hat{Q}$ [see Eq. (55)]. The contributions of $\langle\hat{Q}^2\rangle_2$ in Eqs. (63) and (64), when inserted into Eq. (60), are shown to compensate exactly when one uses the fact that ϕ_0 solves the Gross-Pitaevskii equation. This was expected from the U(1) symmetry of the Hamiltonian: only differences of the phase operator at two points appear in the Hamiltonian, so that H does not depend on $\hat{Q}$ and the mean density does not depend on $\langle\hat{Q}^2\rangle_2$.

We therefore get an equation for $\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3$ involving the expectation value of $\hat{P}^2$ as a source term, and which looks rather involved:

$$\begin{aligned}0=&\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+3g_0\rho_0-\mu\right]\\&\times\left(\frac{\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3-\phi_a^2N_0^{-1}\langle\hat{P}^2\rangle_2-(\langle\hat{B}_n^\dagger\hat{B}_n\rangle_2-\phi_0\phi_a)}{\rho_0^{1/2}}\right)\\&+g_0\rho_0^{1/2}\langle 4(\hat{B}_n^\dagger\hat{B}_n-\phi_0\phi_a)+\hat{B}_n^2+B_n^{\dagger 2}\rangle_2\\&+\langle\hat{P}^2\rangle_2[6g_0\rho_0^{1/2}\partial_{N_0}\sqrt{\rho_0}-2\mu_0']\partial_{N_0}\sqrt{\rho_0}.\end{aligned} \tag{65}$$

Fortunately the underlying physics is very simple and allows us to predict the effect of this source term on the mean density. One first identifies the physical meaning of $\hat{P}$ in Eq. (56). Using the well-known fact that the eigenmodes of $\mathcal{L}_{\mathrm{GP}}$ are orthogonal for the modified scalar product of signature $(1,-1)$, one has [15]

$$\langle\phi_0|u_s\rangle+\langle\phi_0|v_s\rangle\equiv\sum_{\mathbf{r}}l^D\phi_0(\mathbf{r})[u_s(\mathbf{r})+v_s(\mathbf{r})]=0, \tag{66}$$

so that the sum of $\delta\rho_s$ over all spatial nodes vanishes. As a consequence, the operator $\hat{N}$ giving the total number of particles in the gas is simply

$$\hat{N}\equiv\sum_{\mathbf{r}}l^D\hat{\rho}(\mathbf{r})=N_0+\hat{P}, \tag{67}$$

where we have used the identity

$$\sum_{\mathbf{r}}l^D\partial_{N_0}\rho_0(\mathbf{r})=\frac{d}{dN_0}\sum_{\mathbf{r}}l^D\rho_0(\mathbf{r})=\frac{dN_0}{dN_0}=1. \tag{68}$$

The source terms involving $\hat{P}$ therefore correspond to fluctuations in the total number of particles in the gas, due to the fact that we consider the grand canonical ensemble. The effect of these grand canonical fluctuations can be considered for the case of a pure quasicondensate at the order of the present calculation so it is easy to calculate it directly. In the grand canonical ensemble the probability that the quasicondensate has n particles is

$$\Pi_n\propto\exp[-\beta(E_0(n)-\mu n)], \tag{69}$$

where $E_0(n)$ is the Gross-Pitaevskii energy for the density profile $\rho_0(\mathbf{r};n)$:

$$E_0(n)=\sum_{\mathbf{r}}l^D\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\rho_0(\mathbf{r};n)}\Delta\sqrt{\rho_0(\mathbf{r};n)}+U(\mathbf{r})\rho_0(\mathbf{r};n)+\frac{g_0}{2}\rho_0^2(\mathbf{r};n)\right]. \tag{70}$$

The corresponding mean grand canonical density is

$$\rho_{\mathrm{GC}}(\mathbf{r})=\int dn\,\Pi_n\rho_0(\mathbf{r};n), \tag{71}$$

where we treat n as a continuous variable. The zeroth order approximation $n=N_0$ for the number of particles in the quasicondensate is such that $E_0(n)-\mu n$ has a minimum:

$$\frac{d}{dn}[E_0(n)-\mu n]=\mu_0(n)-\mu=0 \quad \text{for} \quad n=N_0 \tag{72}$$

as shown in Eq. (43). The corresponding density profile is $\rho_0(\mathbf{r};N_0)$. The next order correction to that is obtained by expanding the n dependent density profile to second order in $n-N_0$ and by averaging over n:

$$\delta\rho_{\rm GC}(\mathbf{r})=\langle(n-N_0)\rangle\partial_{N_0}\rho_0(\mathbf{r};N_0) + \frac{1}{2}\langle(n-N_0)^2\rangle\partial_{N_0}^2\rho_0(\mathbf{r};N_0). \tag{73}$$

The second moment of $n-N_0$ is calculated to lowest nonvanishing order by a Gaussian approximation to Π_n:

$$E_0(n)-\mu n\simeq E_0(N_0)-\mu N_0+\frac{1}{2}\frac{d^2E_0}{dN_0^2}(n-N_0)^2 = \text{const}+\frac{1}{2}\mu_0'(n-N_0)^2. \tag{74}$$

This leads to

$$\langle(n-N_0)^2\rangle_{\rm Gauss}=\frac{k_BT}{\mu_0'}=\langle\hat{P}^2\rangle_2. \tag{75}$$

More care has to be taken in the calculation of the mean of $n-N_0$: the Gaussian approximation to Π_n gives a vanishing contribution, so that the cubic distortion to it has to be included:

$$E_0(n)-\mu n\simeq E_0(N_0)-\mu N_0+\frac{1}{2}\mu_0'(n-N_0)^2 + \frac{1}{6}\mu_0''(n-N_0)^3, \tag{76}$$

$$\Pi_n\propto\exp\left[-\frac{1}{2}\beta\mu_0'(n-N_0)^2\right]\left[1-\frac{1}{6}\beta\mu_0''(n-N_0)^3\right]. \tag{77}$$

We then get a nonvanishing mean value for $n-N_0$:

$$\langle(n-N_0)\rangle_{\rm distor}=-\frac{1}{6}\beta\mu_0''\langle(n-N_0)^4\rangle_{\rm Gauss} = -\frac{1}{2}\beta\mu_0''(\langle\hat{P}^2\rangle_2)^2. \tag{78}$$

We have therefore predicted in a very simple way the correction to the mean density due to grand canonical fluctuations:

$$\delta\rho_{\rm GC}(\mathbf{r})=\frac{1}{2}\langle\hat{P}^2\rangle_2\left[\partial_{N_0}^2\rho_0(\mathbf{r};N_0)-\frac{\mu_0''}{\mu_0'}\partial_{N_0}\rho_0(\mathbf{r};N_0)\right]. \tag{79}$$

How does this compare to the general formalism (65)? We need to obtain a partial differential equation for $\delta\rho_{\rm GC}$. We just take the second order derivative of the Gross-Pitaevskii equation (41) with respect to N_0 and we replace ρ_0 by $\sqrt{\rho_0^2}$ in the resulting equation and in Eq. (79). This leads to the remarkable identity

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+3g_0\rho_0-\mu\right]\left(\frac{\delta\rho_{\rm GC}-N_0^{-1}\phi_a^2\langle\hat{P}^2\rangle_2}{\rho_0^{1/2}}\right) = -\langle\hat{P}^2\rangle_2[6g_0\rho_0^{1/2}\partial_{N_0}\sqrt{\rho_0}-2\mu_0']\partial_{N_0}\sqrt{\rho_0}. \tag{80}$$

The right-hand side of this identity coincides with the source term of Eq. (65) involving $\hat{P}$. We have therefore successfully identified $\delta\rho_{\rm GC}$ as a piece of $\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3$ and we are left with the simpler equation

$$0=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+3g_0\rho_0-\mu\right] \times\left(\frac{\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3-\delta\rho_{\rm GC}-(\langle\hat{B}_n^\dagger\hat{B}_n\rangle_2-\phi_0\phi_a)}{\rho_0^{1/2}}\right) + g_0\rho_0^{1/2}\langle 4(\hat{B}_n^\dagger\hat{B}_n-\phi_0\phi_a)+\hat{B}_n^2+B_n^{\dagger 2}\rangle_2. \tag{81}$$

We are not totally satisfied yet since the operator $\hat{B}_n$ does not obey bosonic commutation relations when the system is not spatially homogeneous; in particular, the field $\hat{B}_n$ does not commute with itself when taken at two different points:

$$[\hat{B}_n(\mathbf{r}),\hat{B}_n(\mathbf{r}')]=\phi_a(\mathbf{r})\phi_0(\mathbf{r}')-\phi_a(\mathbf{r}')\phi_0(\mathbf{r}), \tag{82}$$

$$[\hat{B}_n(\mathbf{r}),\hat{B}_n^\dagger(\mathbf{r}')]=\frac{1}{l^D}\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}-\phi_0(\mathbf{r})\phi_a(\mathbf{r}') - \phi_0(\mathbf{r}')\phi_a(\mathbf{r}). \tag{83}$$

To circumvent this difficulty we split the field $\hat{B}_n$ into its component along the quasicondensate mode ϕ_0 and its orthogonal component:

$$\hat{B}_n(\mathbf{r})=\hat{\alpha}\phi_0(\mathbf{r})+\hat{\Lambda}(\mathbf{r}). \tag{84}$$

The Bogoliubov functions $u_s(\mathbf{r})$ and $v_s(\mathbf{r})$ can be chosen here to be real. The operator $\hat{\alpha}$ can then be written as

$$\hat{\alpha}=\sum_s\langle\phi_0|u_s\rangle(\hat{b}_s-\hat{b}_s^\dagger), \tag{85}$$

where we have used the property (66). This clearly shows that the operator $\hat{\alpha}$ is anti-Hermitian:

$$\hat{\alpha}^\dagger=-\hat{\alpha}. \tag{86}$$

The field $\hat{\Lambda}$ has the following expansion on $\hat{b}_s$:

$$\hat{\Lambda}(\mathbf{r})=\sum_s u_{s\perp}(\mathbf{r})\hat{b}_s+v_{s\perp}(\mathbf{r})\hat{b}_s^\dagger, \tag{87}$$

where the index $\perp$ indicates projection orthogonally to ϕ_0. This field now has the desired bosonic commutation relations

$$[\hat{\Lambda}(\mathbf{r}),\hat{\Lambda}(\mathbf{r}')]=0, \tag{88}$$

$$[\hat{\Lambda}(\mathbf{r}),\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}')]=\frac{1}{l^D}\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}-\phi_0(\mathbf{r})\phi_0(\mathbf{r}'). \tag{89}$$

Note that $\hat{\alpha}$ does not commute with $\hat{\Lambda}$:

$$[\hat{\alpha},\hat{\Lambda}(\mathbf{r})]=\frac{1}{2}\phi_0(\mathbf{r})-\phi_a(\mathbf{r}). \tag{90}$$

We insert the splitting of $\hat{B}_n$ in Eq. (81). The terms quadratic in $\hat{\alpha}$ cancel exactly, in the same way the terms in $\hat{Q}^2$ canceled. The terms linear in $\hat{\alpha}$ can all be expressed in terms of the expectation value of an anticommutator $\langle\{\hat{\alpha},\hat{\Lambda}\}\rangle_2$ using the commutation relation (90) and the fact that $\langle\hat{\alpha}\hat{\Lambda}\rangle_2$ is a real quantity. Furthermore, using the techniques of Appendix E of [26], as shown here in Appendix D, one obtains a simple partial differential equation for the anticommutator:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+g_0\rho_0-\mu\right]\langle\{\hat{\alpha},\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\}\rangle_2 = -\sum_{\mathbf{r}'} l^D g_0\rho_0(\mathbf{r}')\phi_0(\mathbf{r}')\langle\{\hat{\Lambda}(\mathbf{r}')+\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}'),\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\}\rangle_2. \tag{91}$$

Remarkably, this allows us to eliminate completely the operator $\hat{\alpha}$ in Eq. (81). We finally get an equation for the correction to the mean density involving the operator $\hat{\Lambda}$ only:

$$0=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+3g_0\rho_0-\mu\right]\left(\frac{\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3-\delta\rho_{\mathrm{GC}}-\langle\hat{\Lambda}^\dagger\hat{\Lambda}\rangle_2}{\phi_0}\right)+S(\mathbf{r}), \tag{92}$$

where we have introduced the source term

$$S(\mathbf{r})\equiv g_0N_0\phi_0(\mathbf{r})\langle 4\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r})+\hat{\Lambda}^2(\mathbf{r})+\hat{\Lambda}^{\dagger 2}(\mathbf{r})-\phi_0^2(\mathbf{r})\rangle_2 - \sum_{\mathbf{r}'} l^D g_0\rho_0(\mathbf{r}')\phi_0(\mathbf{r}')\langle\{\hat{\Lambda}(\mathbf{r}')+\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}'),\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\}\rangle_2. \tag{93}$$

It will be convenient to introduce the function $\chi(\mathbf{r})$ defined in a unique way by

$$0=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+3g_0\rho_0-\mu\right]\chi(\mathbf{r})+\frac{1}{2}S(\mathbf{r}). \tag{94}$$

We then obtain the following final expression for the correction to the mean density due to the cubic Hamiltonian terms H_3:

$$\langle\delta\hat{\rho}\rangle_3(\mathbf{r})=\delta\rho_{\mathrm{GC}}(\mathbf{r})+2\phi_0(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r})+\langle\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\rangle_2. \tag{95}$$

In the particular case where the gas is Bose condensed, our general theory for quasicondensates also applies, of course. One then expects that the result (95) has already been obtained for the condensate and can be given a clear physical interpretation. This expectation is totally justified: as shown in Appendix E, the component of $\chi(\mathbf{r})/N_0$ orthogonal to ϕ_0 is the correction given in [15] to the Gross-Pitaevskii condensate wave function ϕ_0 due to the interaction with the noncondensed particles; the component of χ along ϕ_0 describes the condensate depletion, and $\langle\hat{\Lambda}^\dagger\hat{\Lambda}\rangle_2$ is the mean density of noncondensed particles.

III. APPLICATIONS OF THE FORMALISM: GENERAL FORMULAS

A. Equation of state

What is referred to as the *equation of state* of the gas is the expression of the chemical potential as a function of the mean total number of particles N and the temperature T. It is useful in particular to predict properties of an inhomogeneous gas within the local density approximation.

We therefore now have to calculate μ for the quasicondensate. This is equivalent to a calculation of N_0 as μ and N_0 are by definition related through Eq. (43). To lowest order of the theory one assumes a pure quasicondensate with a density profile $\rho(\mathbf{r})=\rho_0(\mathbf{r})$, where $\sqrt{\rho_0}$ solves the Gross-Pitaevskii equation (41). One therefore gets $N=N_0$ so that $\mu=\mu_0(N)$.

The first nonvanishing correction to the density profile is given by Eq. (95). By integrating Eq. (95) over space we get the corresponding correction for the mean total number of particles:

$$N\equiv N_0+\delta N, \tag{96}$$

$$\delta N\simeq\delta N_{\mathrm{GC}}+l^D\sum_{\mathbf{r}}2\phi_0(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r})+l^D\sum_{\mathbf{r}}\langle\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\rangle_2. \tag{97}$$

The contribution to δN due to our use of the grand canonical ensemble can be calculated exactly from a spatial integration of Eq. (79), using the same technique as in Eq. (68):

$$\delta N_{\mathrm{GC}}=-k_BT\frac{\mu_0''}{2\mu_0'^2}. \tag{98}$$

The contribution of the term involving χ can also be made explicit by multiplication of Eq. (94) by $\phi_a(\mathbf{r})$ defined in Eq. (53) and by spatial integration. The function $\phi_a(\mathbf{r})$ is indeed known [27] to solve the partial differential equation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+3g_0\rho_0-\mu\right]\phi_a=N_0\mu_0'\phi_0(\mathbf{r}), \quad (99)$$

which can be checked easily, just by taking the derivative of Eq. (41) with respect to N_0. This leads to

$$l^D\sum_{\mathbf{r}} 2\phi_0(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r})=-\frac{1}{N_0\mu_0'}\sum_{\mathbf{r}} l^D\phi_a(\mathbf{r})S(\mathbf{r}), \quad (100)$$

where the source term S is known explicitly [see Eq. (93)]. We now just have to replace N_0 by $N-\delta N$ in Eq. (43) and expand to first order in δN:

$$\mu=\mu_0(N-\delta N)\simeq\mu_0(N)-\delta N\mu_0'(N_0). \quad (101)$$

We obtain the following expression for μ:

$$\mu\simeq\mu_0(N)+k_BT\frac{\mu_0''}{2\mu_0'}-\mu_0'(N_0)\sum_{\mathbf{r}} l^D\langle\hat\Lambda^\dagger(\mathbf{r})\hat\Lambda(\mathbf{r})\rangle_2 + \frac{1}{N_0}\sum_{\mathbf{r}} l^D\phi_a(\mathbf{r})S(\mathbf{r}). \quad (102)$$

Equivalently, we can replace the source term by its explicit expression to get

$$\mu\simeq\mu_0(N)+k_BT\frac{\mu_0''}{2\mu_0'}-\mu_0'(N_0)\left(\frac{1}{2}+\sum_{\mathbf{r}} l^D\langle\hat\Lambda^\dagger(\mathbf{r})\hat\Lambda(\mathbf{r})\rangle_2\right) + \sum_{\mathbf{r}} l^D g_0[\partial_{N_0}\rho_0(\mathbf{r})](2\langle\hat\Lambda^\dagger\hat\Lambda\rangle_2+\mathrm{Re}\langle\hat\Lambda^2\rangle_2) - \sum_{\mathbf{r}} l^D g_0\phi_0^3(\mathbf{r})\langle\{\hat\Lambda(\mathbf{r})+\hat\Lambda^\dagger(\mathbf{r}),\hat\gamma\}\rangle_2, \quad (103)$$

where we have introduced the operator

$$\hat\gamma=\sum_{\mathbf{r}} l^D\phi_a(\mathbf{r})\hat\Lambda(\mathbf{r}), \quad (104)$$

and we have used the identity

$$\mu_0'=\sum_{\mathbf{r}} l^D g_0\phi_0^2(\mathbf{r})\partial_{N_0}\rho_0(\mathbf{r};N_0) \quad (105)$$

obtained by performing the scalar product of both sides of Eq. (99) with ϕ_0. The application to spatially homogeneous systems will be given in Sec. IV; in this case both the operator $\hat\gamma$ and μ_0'' vanish.

B. Ground state energy

We now show that the ground state energy of a quasicondensate can be calculated with exactly the same Bogoliubov formula as for the ground state energy of a condensate.

We have to determine the ground state energy of H_2. We write it as the expectation value of Eq. (51) at zero temperature, that is here in the vacuum of the $\hat b_s$ and of $\hat P$:

$$\mathcal{E}_{\mathrm{ground}}(H_2)=l^D\sum_{\mathbf{r}}\left\langle\hat B^\dagger\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+g_0\rho_0-\mu\right)\hat B\right\rangle_2 + g_0\rho_0\left\langle\left[\hat B^\dagger\hat B+\frac{1}{2}(\hat B^2+\hat B^{\dagger 2})\right]\right\rangle_2. \quad (106)$$

We reproduce the transformation of Sec. II D. We split $\hat B$ into an anomalous part involving $\hat P,\hat Q$, plus the contributions of the anti-Hermitian operator $\hat\alpha$ and of $\hat\Lambda$, the orthogonal component of the normal part. In the first expectation value of the right-hand side of Eq. (106) the operators $\hat Q$ and $\hat\alpha$ disappear as they come with the factor $\phi_0(\mathbf{r})$ in $\hat B$, and ϕ_0 solves the Gross-Pitaevskii equation (41). The expectation value of $\hat P^2$ in the ground state of H_2 also vanishes, so that

$$\left\langle\hat B^\dagger\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+g_0\rho_0-\mu\right)\hat B\right\rangle_2 =\left\langle\hat\Lambda^\dagger\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+g_0\rho_0-\mu\right)\hat\Lambda\right\rangle_2. \quad (107)$$

The same transformation is applied to the last expectation value in Eq. (106). Remarkably, the terms involving $\hat\alpha$ exactly cancel when one uses the relations (63), (64), (90), and (D5). This leads to

$$\left\langle\left[\hat B^\dagger\hat B+\frac{1}{2}(\hat B^2+\hat B^{\dagger 2})\right]\right\rangle_2 =-\frac{1}{2}\phi_0^2+\left\langle\left[\hat\Lambda^\dagger\hat\Lambda+\frac{1}{2}(\hat\Lambda^2+\hat\Lambda^{\dagger 2})\right]\right\rangle_2. \quad (108)$$

The expectation values involving $\hat\Lambda$ are readily calculated from the modal expansion (87):

$$\mathcal{E}_{\mathrm{ground}}(H_2)=-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r}} l^D g_0\rho_0\phi_0^2 + \sum_s\langle v_{s\perp}|\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U+2g_0\rho_0-\mu\right)|v_{s\perp}\rangle + g_0\rho_0|u_{s\perp}\rangle\right]. \quad (109)$$

As (u_s,v_s) is an eigenvector of $\mathcal{L}_{\mathrm{GP}}$,$(u_{s\perp},v_{s\perp})$ is an eigenvector of the operator $\mathcal{L}$ defined in [15] and this expression can be further simplified to

$$\mathcal{E}_{\mathrm{ground}}(H_2)=-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r}} l^D g_0\rho_0\phi_0^2-\sum_s\epsilon_s\langle v_{s\perp}|v_{s\perp}\rangle. \quad (110)$$

The last step is to include the contribution of H_0 and to remove the $-\mu\hat{N}$ term from the grand canonical Hamiltonian. The ground state energy of the canonical Hamiltonian for N particles is therefore

$$E_{\text{ground}}(N) \simeq \mu N + E_0(N_0) - \mu N_0 + \mathcal{E}_{\text{ground}}(H_2), \quad (111)$$

where E_0 is the Gross-Pitaevskii energy (70). As we did in Sec. III A we replace N_0 by $N-\delta N$, where δN is calculated from H_3, and we expand $E_0(N-\delta N)$ to first order in δN:

$$\mu N + E_0(N_0) - \mu N_0 \simeq E_0(N) - \delta N(\mu_0(N) - \mu) \simeq E_0(N). \quad (112)$$

We recall that by definition $\mu = \mu_0(N_0)$. The first term in the right-hand side of Eq. (110) amounts to performing a small change in the Gross-Pitaevskii energy functional, expressing the fact that a given particle interacts in the gas with $N-1$ particles so that the mean field term should be proportional to $N-1$ rather than to N. The final expression for the ground state energy is

$$E_{\text{ground}}(N) \simeq N \sum_{\mathbf{r}} l^D \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\phi_0(\mathbf{r};N)\Delta\phi_0(\mathbf{r};N) + U(\mathbf{r})\phi_0^2(\mathbf{r};N) + \frac{1}{2}g_0(N-1)\phi_0^4(\mathbf{r};N)\Big] - \sum_s \epsilon_s \langle v_{s\perp}|v_{s\perp}\rangle. \quad (113)$$

This exactly coincides with the Bogoliubov result; see, e.g., Eq. (71) of [15].

C. Second order correlation function

The second order correlation function of the atomic field is defined as

$$g_2(\mathbf{r}) \equiv \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{0})\hat{\psi}(\mathbf{0})\hat{\psi}(\mathbf{r})\rangle, \quad (114)$$

where we have taken for simplicity one of the two points as the origin of the coordinates. To calculate g_2 with the formalism of this paper we have to express g_2 in terms of the operator $\hat{\rho}$ giving the density. This is achieved using the commutation relation (4) of the bosonic field $\hat{\psi}$:

$$g_2(\mathbf{r}) = \langle \hat{\rho}(\mathbf{r})\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle - \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{l^D}\langle\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle. \quad (115)$$

We then insert the splitting (32) of $\hat{\rho}$ in terms of the quasicondensate density ρ_0 and the fluctuations $\delta\hat{\rho}$:

$$g_2(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r})\rho_0(\mathbf{0}) + \rho_0(\mathbf{0})\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\rangle + \rho_0(\mathbf{r})\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle + \langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle - \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{l^D}[\rho_0(\mathbf{0}) + \langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle]. \quad (116)$$

This expression for g_2 is still exact. We now perform approximations consistent with an expansion of g_2 up to second order in the small parameters $\epsilon_{1,2}$. The expectation value of the term quadratic in $\delta\hat{\rho}$ is calculated within the thermal equilibrium for the quadratic Hamiltonian H_2. The expectation value of $\delta\hat{\rho}$ is evaluated in Sec. II D by inclusion of the cubic perturbation H_3. The contribution of $\delta\hat{\rho}$ in the last term of Eq. (116) is negligible as it is ϵ_1^4 times smaller than the leading term in g_2. We therefore obtain the explicit expression

$$g_2(\mathbf{r}) \simeq \rho_0(\mathbf{r})\rho_0(\mathbf{0}) + \rho_0(\mathbf{0})\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\rangle_3 + \rho_0(\mathbf{r})\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle_3 + \langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle_2 - \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{l^D}\rho_0(\mathbf{0}). \quad (117)$$

This formulation, however, is not the optimal one as the last term in $1/l^D$ gives the wrong impression that $g_2(0)$ strongly depends on the discretization length l in the continuous limit $l\to 0$. In fact, this strong dependence exactly compensates a term in $1/l^D$ in the density fluctuations $\langle\delta\hat{\rho}^2(\mathbf{0})\rangle$ coming from the fact that $\delta\hat{\rho}^2(\mathbf{0})$ is a product of field operators not in normal order. To reveal this fact we express $\delta\hat{\rho}$ in terms of the operator $\hat{\Lambda}$ of Eq. (87):

$$\delta\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho_0(\mathbf{r})}[\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) + \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})] + \hat{P}\,\partial_{N_0}\rho_0(\mathbf{r};N_0), \quad (118)$$

and we put the resulting expression in normal order with respect to the field $\hat{\Lambda}$ using the bosonic commutation relation (89):

$$\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0}) = :\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0}): + \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{l^D}\rho_0(\mathbf{0}) - N_0\phi_0^2(\mathbf{r})\phi_0^2(\mathbf{0}), \quad (119)$$

where : : is the standard notation to represent normal order. The spurious term in $1/l^D$ is then exactly canceled:

$$g_2(\mathbf{r}) = N_0(N_0-1)\phi_0^2(\mathbf{r})\phi_0^2(\mathbf{0}) + \rho_0(\mathbf{0})\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\rangle_3 + \rho_0(\mathbf{r})\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{0})\rangle_3 + \langle:\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0}):\rangle_2. \quad (120)$$

This expression allows a proof of the equivalence with the prediction for g_2 in the Bogoliubov theory. We do not present the calculations here, as they are a straightforward application of Appendix E. Finally, we give a last alternative expression for g_2 equivalent to Eq. (120) at the present order:

$$g_2(\mathbf{r}) = (1-1/N)\rho(\mathbf{0})\rho(\mathbf{r}) + \langle:\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{0}):\rangle_2, \quad (121)$$

where N is the mean total number of particles and ρ is the mean total density:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}) + \langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\rangle_3. \quad (122)$$

D. First order correlation function

The first order correlation function of the field is defined as

$$g_1(\mathbf{r}) \equiv \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{0})\rangle = \langle \sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{r})}e^{i[\hat{\theta}(\mathbf{0})-\hat{\theta}(\mathbf{r})]}\sqrt{\hat{\rho}(\mathbf{0})}\rangle. \tag{123}$$

As previously done we perform the calculation up to second order in the small parameters $\epsilon_{1,2}$. We therefore expand $\sqrt{\hat{\rho}}$ up to second order in $\delta\hat{\rho}$ using Eq. (34). Note that we do not expand the exponential in $\hat{\theta}(\mathbf{0})-\hat{\theta}(\mathbf{r})$, contrary to what we did in the Hamiltonian: as $\mathbf{r}$ and $\mathbf{0}$ are not neighboring points of the lattice anymore, the phase difference of the field can be arbitrarily large. The expansion in $\delta\hat{\rho}$ gives rise to six terms:

$$g_1(\mathbf{r}) = \rho_0^{1/2}(\mathbf{r})\rho_0^{1/2}(\mathbf{0})\Big[\langle e^{i\Delta\theta}\rangle + \frac{1}{2}\langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})e^{i\Delta\theta} + e^{i\Delta\theta}\delta\tilde{\rho}(\mathbf{0})\rangle - \frac{1}{8}\langle \delta\tilde{\rho}^2(\mathbf{r})e^{i\Delta\theta} + e^{i\Delta\theta}\delta\tilde{\rho}^2(\mathbf{0}) - 2\,\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})e^{i\Delta\theta}\delta\tilde{\rho}(\mathbf{0})\rangle\Big], \tag{124}$$

where we have introduced the following notation to simplify the writing:

$$\Delta\theta \equiv \hat{\theta}(\mathbf{0}) - \hat{\theta}(\mathbf{r}) \tag{125}$$

$$\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})}{\rho_0(\mathbf{r})}. \tag{126}$$

We calculate the expectation values in this expression in two steps, first using the thermal equilibrium distribution for H_2, and then including the corrections due to H_3.

The thermal expectation values corresponding to the quadratic Hamiltonian H_2 are evaluated using Wick's theorem. One first expands the exponential in powers of $\Delta\theta$, one calculates the expectation value of each term, and then one performs an exact resummation of the resulting series. This leads to the simple identities

$$\langle e^{i\Delta\theta}\rangle_2 = e^{-\langle(\Delta\theta)^2\rangle_2/2}, \tag{127}$$

$$\langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})e^{i\Delta\theta}\rangle_2 = e^{-\langle(\Delta\theta)^2\rangle_2/2}\langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})i\Delta\theta\rangle_2, \tag{128}$$

$$\langle \delta\tilde{\rho}^2(\mathbf{r})e^{i\Delta\theta}\rangle_2 = e^{-\langle(\Delta\theta)^2\rangle_2/2} \times [\langle \delta\tilde{\rho}^2(\mathbf{r})\rangle_2 + (\langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})i\Delta\theta\rangle_2)^2], \tag{129}$$

$$\langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})e^{i\Delta\theta}\delta\tilde{\rho}(\mathbf{0})\rangle_2 = e^{-\langle(\Delta\theta)^2\rangle_2/2}[\langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})\,\delta\tilde{\rho}(\mathbf{0})\rangle_2 + \langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})i\Delta\theta\rangle_2\langle i\Delta\theta\,\delta\tilde{\rho}(\mathbf{0})\rangle_2]. \tag{130}$$

The expectation value of a product of the density fluctuation $\delta\hat{\rho}$ and of the phase variation $i\Delta\theta$ is particularly simple. In classical field theory this expectation value would obviously vanish, as there is no crossed term in H_2 between the density fluctuations and the phase. In the present quantum field theory this is not exactly the case as $\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$ do not commute. To show that, we use the fact that the Bogoliubov mode functions $u_s(\mathbf{r})$ and $v_s(\mathbf{r})$ can be chosen to be real, so that $\delta\hat{\rho}$ and $i\Delta\theta$ are linear combinations of $\hat{b}_s, \hat{b}_s^\dagger, \hat{P}$ with real coefficients. As a consequence,

$$\langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})i\Delta\theta\rangle_2 = \langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})i\Delta\theta\rangle_2^* = -\langle i\Delta\theta\,\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})\rangle. \tag{131}$$

This leads to

$$\langle \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})i\Delta\theta\rangle_2 = \frac{i}{2}\langle[\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r}), \Delta\theta]\rangle_2 = \frac{1-\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{2\rho_0(\mathbf{r})l^D}. \tag{132}$$

The same reasoning can be applied for the other expectation value:

$$\langle i\Delta\theta\,\delta\tilde{\rho}(\mathbf{0})\rangle_2 = \frac{1-\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{2\rho_0(\mathbf{0})l^D}. \tag{133}$$

These expressions are second order in $\epsilon_{1,2}$. An important consequence is that the product of such crossed phase-density expectation values in Eqs. (129) and (130) is actually negligible at the present order of the calculation. The resulting form for g_1, at the level of H_2, is quite simple:

$$g_1(\mathbf{r})|_{H_2} = \rho_0^{1/2}(\mathbf{r})\rho_0^{1/2}(\mathbf{0})e^{-\langle(\Delta\theta)^2\rangle_2/2}\Big[1 - \frac{1}{8}\langle(\Delta\delta\tilde{\rho})^2\rangle_2 + \frac{1}{4}\mathcal{E}_{\text{scoria}}(\mathbf{r})\Big]. \tag{134}$$

The notation $\Delta\delta\tilde{\rho}$ is similar to the one for the phase:

$$\Delta\delta\tilde{\rho} \equiv \delta\tilde{\rho}(\mathbf{0}) - \delta\tilde{\rho}(\mathbf{r}) \tag{135}$$

and $\mathcal{E}_{\text{scoria}}$ comes from the crossed expectation value of $\Delta\theta$ and $\delta\tilde{\rho}$:

$$\mathcal{E}_{\text{scoria}}(\mathbf{r}) \equiv (1-\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}})\left(\frac{1}{\rho_0(\mathbf{r})l^D} + \frac{1}{\rho_0(\mathbf{0})l^D}\right). \tag{136}$$

At this point we face the same apparent problem as in the calculation of g_2: $\mathcal{E}_{\text{scoria}}$ scales as $1/l^D$ and gives the wrong impression that our expression for g_1 will depend dramatically on l in the continuous limit $l \to 0$. As in the case of g_2, we solve this problem by expressing $\delta\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$ in terms of the field $\hat{\Lambda}$ and putting the operators $\hat{\Lambda}$ and $\hat{\Lambda}^\dagger$ in normal order. We use Eq. (118) for the expression for $\delta\hat{\rho}$. For the difference of two phase operators, $\hat{Q}$ and the anti-Hermitian operator $\hat{\alpha}$ cancel so that

$$\Delta\theta = \frac{1}{2i}(\Delta\tilde{\Lambda} - \Delta\tilde{\Lambda}^{\dagger}), \tag{137}$$

where we have introduced the notation

$$\tilde{\Lambda}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\hat{\Lambda}(\mathbf{r})}{\rho_0^{1/2}(\mathbf{r})}, \tag{138}$$

$$\Delta\tilde{\Lambda} \equiv \tilde{\Lambda}(\mathbf{0}) - \tilde{\Lambda}(\mathbf{r}). \tag{139}$$

After some calculations we arrive at

$$\langle(\Delta\delta\tilde{\rho})^2\rangle_2 = \langle{:}(\Delta\delta\tilde{\rho})^2{:}\rangle_2 + \mathcal{E}_{\text{scoria}}(\mathbf{r}), \tag{140}$$

$$\langle(\Delta\theta)^2\rangle_2 = \langle{:}(\Delta\theta)^2{:}\rangle_2 + \frac{1}{4}\mathcal{E}_{\text{scoria}}(\mathbf{r}). \tag{141}$$

As $\mathcal{E}_{\text{scoria}}$ is second order in $\epsilon_{1,2}$, its exponential function can be expanded to first order. We then find as expected that all the $1/l^D$ terms exactly cancel:

$$g_1(\mathbf{r})|_{H_2} = \rho_0^{1/2}(\mathbf{r})\rho_0^{1/2}(\mathbf{0})e^{-\langle{:}(\Delta\theta)^2{:}\rangle_2/2}\left[1 - \frac{1}{8}\langle{:}(\Delta\delta\tilde{\rho})^2{:}\rangle_2\right]. \tag{142}$$

The last step is to include the first order correction to g_1 coming from the cubic Hamiltonian H_3. One then has to calculate expectation values with the thermal equilibrium density operator $\exp[-\beta(H_2+H_3)]$ to first order in H_3. This thermal density operator can be viewed as the evolution operator during the imaginary time $-i\hbar\beta$ so that one can use first order time dependent perturbation theory to get

$$\langle\hat{O}\rangle_3 \simeq \langle\hat{O}\rangle_2 - \int_0^{\beta} d\tau\langle e^{\tau H_2}H_3 e^{-\tau H_2}\hat{O}\rangle_2, \tag{143}$$

where $\hat{O}$ is an arbitrary operator of the gas and where we have used the fact that H_3 has a vanishing expectation value in the thermal equilibrium state for H_2. One is back to the calculation of expectation values of some operators in the thermal state corresponding to H_2. Wick's theorem can be applied. The resulting calculations are very similar to the ones leading to Eq. (142), but more involved, and are detailed in Appendix F. The same phenomenon occurs, that terms of a higher order than the present calculation can be neglected. One then gets

$$\langle e^{i\Delta\theta}\rangle_3 \simeq e^{-\langle(\Delta\theta)^2\rangle_2/2}[1 + \langle i\Delta\theta\rangle_3], \tag{144}$$

$$\langle\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})e^{i\Delta\theta}\rangle_3 \simeq e^{-\langle(\Delta\theta)^2\rangle_2/2}[\langle\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})i\Delta\theta\rangle_2 + \langle\delta\tilde{\rho}(\mathbf{r})\rangle_3]. \tag{145}$$

The first terms in the right-hand sides of Eqs. (144) and (145) already appeared at the level of H_2, and the second terms are corrections due to H_3 that we now take into account. There is no need to include H_3 corrections to the other terms of Eq. (124) since they are quadratic in $\delta\hat{\rho}$ and are therefore already of second order. The expectation values of the phase $\hat{\theta}$ and of the density fluctuations $\delta\hat{\rho}$ have been calculated in Sec. II D. It was found that the expectation value of the phase operator is space independent so that $\langle\Delta\theta\rangle_3$ vanishes. The expectation value of the density fluctuations including the effect of H_3 was given in Eq. (95) and is in general different from zero. Remarkably, the whole effect on the correlation function g_1 of the first order correction in H_3 is to replace $\rho_0(\mathbf{r})$ by the total mean density $\rho(\mathbf{r})$ defined in Eq. (122).

We write our final expression for the first order correlation function of the field, calculated consistently up to $\epsilon_{1,2}^2$:

$$g_1(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{0})}\exp\left[-\frac{1}{2}\langle{:}(\Delta\theta)^2{:}\rangle_2 - \frac{1}{8}\langle{:}(\Delta\delta\tilde{\rho})^2{:}\rangle_2\right]. \tag{146}$$

Note that we have inserted the contribution of the density fluctuations inside the exponential factor, which is allowed at the order of the present calculation since this contribution is of order $\epsilon_{1,2}^2$.

What happens in the regime where a true condensate is present? Both phase and density fluctuations are small, so that the exponential function in Eq. (146) can be expanded to first order. We then express $\Delta\theta$ and $\Delta\tilde{\rho}$ in terms of the operator $\hat{\Lambda}$ and the operator $\hat{P}$. Since the Bogoliubov theory is usually considered in the canonical ensemble we remove the terms corresponding to the grand canonical fluctuations of the particle number. We then recover exactly the Bogoliubov prediction:

$$g_1^{\text{Bog}}(\mathbf{r}) = \Psi_c(\mathbf{r})\Psi_c(\mathbf{0}) + \langle\hat{\Lambda}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{0})\rangle, \tag{147}$$

where $\Psi_c(\mathbf{r}) = \sqrt{N_0}\phi_0(\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{r})/\sqrt{N_0}$ is the condensate field. Amazingly, the general formula (146) for quasicondensates can be related to the Bogoliubov formula in the following very simple way:

$$g_1(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{0})}\exp\left[\frac{g_1^{\text{Bog}}(\mathbf{r})}{\sqrt{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{0})}} - 1\right]. \tag{148}$$

IV. EXPLICIT RESULTS FOR THE SPATIALLY HOMOGENEOUS CASE

In this section we apply our approach to a spatially homogeneous Bose gas. The quasicondensate density is then uniform:

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \frac{N_0}{L^D} = \frac{\mu}{g_0}. \tag{149}$$

The Bogoliubov equations (50) can then be exactly solved for any dimension of space and lead to $u_k(r) = \bar{u}_k e^{ikr}/L^{D/2}$ and $v_k(r) = \bar{v}_k e^{ikr}/L^{D/2}$ with

$$\bar{u}_k - \bar{v}_k = \left[\frac{\hbar^2k^2/2m + 2\mu}{\hbar^2k^2/2m}\right]^{1/4}$$

and

$$\overline{u}_k+\overline{v}_k=\left[\frac{\hbar^2k^2/2m}{\hbar^2k^2/2m+2\mu}\right]^{1/4}. \tag{150}$$

The corresponding eigenenergies are given by

$$\epsilon_k=\left[\frac{\hbar^2k^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}+2\mu\right)\right]^{1/2}. \tag{151}$$

A. Equation of state

From the general expression (103) for the chemical potential of the gas we arrive in the thermodynamic limit at

$$\mu=\rho g_0+g_0\int_{\mathcal{D}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}[(\overline{u}_k+\overline{v}_k)^2n_k+\overline{v}_k(\overline{u}_k+\overline{v}_k)], \tag{152}$$

where $n_k=1/[\exp(\beta\epsilon_k)-1]$ is the mean occupation number of the Bogoliubov mode $\mathbf{k}$. $\mathcal{D}=[-\pi/l,\pi/l]^D$ is the square domain of integration in the $\mathbf{k}$ space. The integral over the wave vector $\mathbf{k}$ does not contain any infrared divergence for any dimension of space. However, the long wave vector behavior given by

$$\overline{v}_k(\overline{u}_k+\overline{v}_k)\simeq-\frac{m\mu}{\hbar^2k^2} \tag{153}$$

gives rise to an integral convergent in 1D and divergent in 2D and 3D in the $l\to0$ limit. This gives the impression that the result depends strongly on l. The solution of this paradox comes from the link between the bare coupling constant g_0 of the model potential in the discretized space and the low-energy two-body scattering properties of the exact potential in the continuous space. This gives to g_0 in two and three dimensions a dependence in l so that our expression for μ does not depend on l anymore in the $l\to0$ limit. In one dimension, the bare coupling g_0 is simply equal to the actual coupling strength g for $l\to0$ and there is no divergence. At $T=0$, Eq. (152) leads to

$$\mu=g\rho\left(1-\frac{1}{\pi\rho\xi}\right), \tag{154}$$

where ξ is the healing length defined in Eq. (23). This agrees with the result of Lieb and Liniger in the weak interaction limit [28]. In three dimensions, we refer to the Appendix of [26] where the calculation has been done. One finds

$$g_0=\frac{g}{1-g\int_{\mathcal{D}}[d\mathbf{k}/(2\pi)^3](m/\hbar^2k^2)}. \tag{155}$$

g is the usual 3D coupling strength given by

$$g=\frac{4\pi\hbar^2a}{m}, \tag{156}$$

where a is the exact potential scattering length. A more explicit form of Eq. (155) is

$$g_0=\frac{g}{1-\mathcal{K}a/l}, \tag{157}$$

where $\mathcal{K}=2.442\ldots$. It has to be noted that the difference between g_0 and g is still small in the validity domain of our approach since it is a second order correction in $\epsilon_{1,2}$: taking $l\sim\xi$ one finds $a/l\sim1/\rho l^3$. Replacing the first factor g_0 in Eq. (152) with the formula (155) expanded up to second order in $\epsilon_{1,2}$ gives

$$\mu=\rho g+g_0\int_{\mathcal{D}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left((\overline{u}_k+\overline{v}_k)^2n_k+\overline{v}_k(\overline{u}_k+\overline{v}_k)+\frac{m\mu}{\hbar^2k^2}\right). \tag{158}$$

One can then safely take the $l\to0$ limit. At $T=0$, the integration gives:

$$\mu=g\rho\left(1+\frac{32\sqrt{\pi}}{3}\sqrt{\rho a^3}\right) \tag{159}$$

which is the same result as Lee and Yang's [33]. In two dimensions, the low-energy two-body scattering of a general short range potential is described by a single length a also named the scattering length. In a continuous space, the T matrix can be calculated in the low-energy limit:

$$\langle\mathbf{k}|T(E+i\eta)|\mathbf{k}'\rangle\simeq-\frac{2\pi\hbar^2}{m[\ln(ak_0/2)+C-i\pi/2]}, \tag{160}$$

where $C=0.57721\ldots$ is the Euler constant, a is the scattering length, $E=\hbar^2k_0^2/m$, and $\eta\to0^+$. We can also calculate the T matrix for the discrete δ potential defined by Eq. (27), which can also be expressed as

$$V=\frac{g_0}{l^2}|\mathbf{r}=0\rangle\langle\mathbf{r}=0|. \tag{161}$$

The general scattering theory gives the relations between the T matrix, the propagator G, and the free propagator G_0:

$$T=V+VGV, \tag{162}$$

$$G=G_0+G_0VG. \tag{163}$$

Using these relations and Eq. (161) for the potential, we find

$$\langle\mathbf{k}|T_{\mathrm{grid}}(E+i\eta)|\mathbf{k}'\rangle=\frac{g_0}{1-g_0\langle\mathbf{r}=0|G_0(E+i\eta)|\mathbf{r}=0\rangle}. \tag{164}$$

The only term we need to calculate is the free propagator taken at the origin, which is conveniently performed with a Fourier transform:

$$\langle \mathbf{r}=0|G_0(E+i\eta)|\mathbf{r}=0\rangle = \int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{E+i\eta-\hbar^2k^2/m}. \tag{165}$$

We split the square $\mathcal{D}$ into a disk of radius π/l and the complementary domain. Integration over the complementary domain gives simply a constant term in the low-energy limit $E \ll \hbar^2/ml^2$:

$$J \equiv \frac{2\pi\hbar^2}{m} \int_{\mathcal{D}-\text{disk}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{E+i\eta-\hbar^2k^2/m}$$

$$\simeq -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{D}-\text{disk}} \frac{d\mathbf{k}}{k^2} = \frac{2G}{\pi} - \ln(2), \tag{166}$$

where $G=0.91596\ldots$ is the Catalan constant. The disk integration is straightforward and leads to the following expression for the T matrix:

$$\langle \mathbf{k}|T_{\text{grid}}(E+i\eta)|\mathbf{k}'\rangle = \frac{1}{1/g_0-(m/2\pi\hbar^2)\ln(lk_0/\pi)+im/4\hbar^2-(m/2\pi\hbar^2)J}. \tag{167}$$

We now take $T_{\text{grid}}=T$, where T is approximated by Eq. (160), in order to reproduce the low-energy scattering properties of the exact potential. This leads to

$$\frac{1}{g_0} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left[\ln\left(\frac{l}{\pi a}\right) - C + \frac{2G}{\pi}\right]. \tag{168}$$

Note that the condition (26) has to be satisfied in our approach. In two dimensions, this gives $\hbar^2/mg_0 \gg 1$, or using Eq. (168)

$$\frac{1}{2\pi}\ln\left(\frac{l}{a}\right) \gg 1. \tag{169}$$

We now show that the logarithmic dependence on l appearing in g_0, Eq. (168), exactly cancels the one appearing in the equation of state. Equation (152) can be rewritten as

$$\rho = \frac{\mu}{g_0} - \int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}[(\overline{u_k}+\overline{v_k})^2 n_k + \overline{v_k}(\overline{u_k}+\overline{v_k})]. \tag{170}$$

In the thermal part, one can immediately take the $l \to 0$ limit. In order to calculate the integral corresponding to the $T=0$ case, we use the same technique as for the calculation of g_0: the integration is done on a disk domain of radius π/l and we keep as a correction the integration over the complementary domain. The complementary domain integration is done by using the high-wave-vector behavior of $\overline{v_k}(\overline{u_k}+\overline{v_k})$, Eq. (153). This leads to

$$-\int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \overline{v_k}(\overline{u_k}+\overline{v_k}) = \frac{m\mu}{4\pi\hbar^2}\left[\ln\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2\mu}\right) - 1 - 2J\right]. \tag{171}$$

Using Eqs. (168) and (171) in Eq. (170), we arrive at an implicit equation of state:

$$\rho = \frac{m\mu}{4\pi\hbar^2}\ln\left(\frac{4\hbar^2}{a^2 m\mu e^{2C+1}}\right) - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}(\overline{u_k}+\overline{v_k})^2 n_k. \tag{172}$$

Remarkably, this is identical to the result (20.45) obtained by the functional integral method in [7]. At $T=0$, one can show from the condition $\rho\xi^2 \gg 1$ [see Eq. (26)] that the validity condition of our approach is $\ln(1/\rho a^2) \gg 4\pi$. If one approximately inverts Eq. (172), neglecting constant terms and $\ln[\ln(1/\rho a^2)]$ with respect to $\ln(1/\rho a^2)$, one recovers Schick's formula [34].

B. Are density and gradient-of-phase fluctuations small?

As mentioned in Sec. II B, our approach relies in particular on two assumptions: the assumption that the relative density fluctuation ϵ_1 is small, and the assumption that the phase variation ϵ_2 between two neighboring points of the grid is small.

Let us consider first the relative density fluctuations. Because of Eq. (119), their mean square value can be separated into two parts:

$$\epsilon_1^2 = \frac{\langle \delta\hat{\rho}^2(\mathbf{0})\rangle_2}{\rho_0^2} = \frac{1}{\rho_0 l^D} + \frac{\langle :\delta\hat{\rho}^2(\mathbf{0}):\rangle_2}{\rho_0^2}, \tag{173}$$

where we have neglected $1/L^D$ with respect to $1/l^D$ in the thermodynamic limit. The second term in Eq. (173), involving the normal order, is expressed in terms of the $\overline{u_k}, \overline{v_k}$ in the thermodynamic limit as

$$\frac{\langle :\delta\hat{\rho}^2(\mathbf{0}):\rangle_2}{\rho_0^2} = \frac{2}{\rho_0}\int_{\mathcal{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}[(\overline{u_k}+\overline{v_k})^2 n_k + \overline{v_k}(\overline{u_k}+\overline{v_k})], \tag{174}$$

where the integration domain is $\mathcal{D}=[-\pi/l, \pi/l]^D$. At zero temperature one introduces the change of variable $\mathbf{q}=\mathbf{k}\xi$ in the integral: one finds that Eq. (174) is of the order of $1/\rho_0\xi$ in 1D, of the order of $\ln(\xi/l)/\rho_0\xi^2$ in 2D, and of the order of $1/\rho_0\xi^2 l$ in 3D. Since $l<\xi$ the second term in Eq. (173) is dominated by the first term, and one has indeed

$$\epsilon_1^2 \simeq \frac{1}{\rho_0 l^D}. \tag{175}$$

At finite temperature we have to calculate the thermal contribution to Eq. (174) involving the occupation number n_k.

At a temperature $k_B T < \mu$ we use the low-momentum expansion of u_k+v_k, and ϵ_k and we find that the thermal contribution is $(k_B T/\mu)^{D+1}(l/\xi)^D$ times smaller than $1/\rho_0 l^D$.

At a temperature $k_BT>\mu$, that is, $\lambda<\xi$, the treatment depends on the dimension of space. In 1D the main contribution to the integral comes from the domain $\epsilon_k\sim\mu$, over which one can approximate the Bose formula by its low-energy limit k_BT/ϵ_k. This leads to a normal ordered fluctuation (174) of the order of $k_BT/(\mu\rho_0\xi)$. This is larger than $1/\rho_0\lambda$ so that the condition $l<\lambda$ then no longer implies that the first term $1/\rho_0 l$ in Eq. (173) is the dominant one. For convenience, one can however adjust l to a value such that

$$\frac{1}{\rho_0 l}\sim\frac{k_BT}{\mu}\frac{1}{\rho_0\xi}. \tag{176}$$

The condition for weak density fluctuations then becomes

$$\epsilon_1^2\sim\frac{k_BT}{\mu}\frac{1}{\rho_0\xi}\ll 1. \tag{177}$$

Using $\rho_0\simeq\rho$ and $\mu\simeq g\rho$ we recover the condition already obtained in [5] with a pure classical field approach. Note that this condition can be rewritten as $\xi\ll l_c$ where the coherence length of the field will be defined in Eq. (187). In 2D both the low-energy domain $\epsilon_k<k_BT$ and the high-energy domain $\epsilon_k>k_BT$ have important contributions. In the low-energy domain we approximate the Bose law by its low-energy limit. In the high-energy domain we keep the full Bose law but, ϵ_k being then larger than μ, we approximate $\overline{u_k}+\overline{v_k}$ by unity and ϵ_k by $\hbar^2k^2/2m$. This leads to a normal ordered fluctuation (174) of the order of $\ln(k_BT/\mu)k_BT/(\mu\rho_0\xi^2)$, a quantity that is larger than $1/\rho_0\lambda^2$. As in 1D we therefore adjust l so that

$$\epsilon_1^2\sim\frac{1}{\rho_0 l^2}\sim\frac{k_BT}{\mu}\ln\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)\frac{1}{\rho_0\xi^2}. \tag{178}$$

In 3D the high-energy domain $\epsilon_k>k_BT$ gives the dominant contribution so that the normal ordered expectation value (174) scales as $1/\rho_0\lambda^3$. This is dominated by the first term in Eq. (173) so that the estimate (175) applies as soon as $l<\lambda,\xi$.

Let us consider now the condition that the mean squared phase change over a grid cell,

$$\epsilon_2^2=\langle(l\nabla\hat{\theta})^2\rangle_2=\frac{l^2}{2\rho_0}\int_{\mathcal{D}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}k^2(\overline{u_k}-\overline{v_k})^2(n_k+1/2), \tag{179}$$

is much smaller than unity. The presence of the factor k^2 inside the integral, coming from the action of ∇, has the consequence that the contribution to the integral is dominated by the high energy domain. At zero temperature one can replace $\overline{u_k}-\overline{v_k}$ by unity since the integral is dominated by wave vectors $k\sim 1/l>1/\xi$. This leads to

$$\epsilon_2^2\sim\frac{1}{\rho_0 l^D} \tag{180}$$

whatever the dimension D.

At a temperature $k_BT<\mu$ we estimate the thermal contribution by replacing $\overline{u_k}-\overline{v_k}$ and ϵ_k by their low-momentum approximations: the thermal contribution is then $(l/\lambda)^{2+D}(\xi/\lambda)^D$ times smaller than the zero-temperature result (180) and is therefore negligible since $l<\xi<\lambda$.

At a temperature $k_BT>\mu$ we use the high-energy approximation, replacing $\overline{u_k}-\overline{v_k}$ by unity and ϵ_k by $\hbar^2k^2/2m$. Note that this works even in 1D because of the presence of the k^2 factor in the integral (179). This leads to a thermal contribution which is $(l/\lambda)^{2+D}$ times smaller than the zero-temperature contribution (180), and which is negligible since $l<\lambda$.

We conclude that the small parameter ϵ_2 of the theory, ensuring that there is a weak phase variation over a grid cell, is always given by Eq. (180) provided that the conditions (22), (25), and (26) are satisfied.

One may wonder if the corrections of the mean density due to the interaction H_3 between the Bogoliubov modes lead to an extra validity condition of our treatment. For the considered case of a spatially homogeneous gas it turns out that the answer to this question is no. One has indeed the remarkable identity in the thermodynamic limit

$$\frac{1}{\rho_0}\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})\rangle_3=-\frac{1}{2\rho_0^2}\langle:\delta\hat{\rho}(\mathbf{r})^2:\rangle_2. \tag{181}$$

If the relative density fluctuations are weak, the relative correction to the density will also be weak.

To end this subsection we discuss briefly the second order correlation function of the field $g_2(\mathbf{r})$. Restricting the general formula (121) to the spatially homogeneous case in the thermodynamic limit, we obtain

$$g_2(\mathbf{r})=\rho^2+2\rho\int_{\mathcal{D}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}[(\overline{u_k}+\overline{v_k})^2n_k+\overline{v_k}(\overline{u_k}+\overline{v_k})]\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}). \tag{182}$$

Limiting cases of this general formula can be compared to existing results in the literature. At zero temperature for a 1D Bose gas one gets for $r=0$,

$$g_2(0)=\rho^2\left(1-\frac{2}{\pi\rho\xi}\right). \tag{183}$$

This formula can be checked from [28]: the mean interaction energy per particle v is equal to $g_2(0)$ multiplied by $g/2\rho$, and v can be calculated in the weakly interacting regime by combining (3.29) of [28] (relating v to the derivative of the ground state energy with respect to g) and (4.2) of [28] (giving the ground state energy in the Bogoliubov approximation). This exactly leads to Eq. (183). This prediction for $g_2(0)$ also appears in [35].

C. First order correlation function

Because of the general formula (148) the first order correlation function of the field for the quasicondensate is immediately related to that of the Bogoliubov theory, here in the thermodynamic limit

$$\ln[g_1(\mathbf{r})/\rho]=\frac{g_1^{\mathrm{Bog}}(\mathbf{r})}{\rho}-1$$
$$=-\frac{1}{\rho}\int\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}[(\overline{u_k^2}+\overline{v_k^2})n_k+\overline{v_k^2}]$$
$$\times(1-\cos\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}). \tag{184}$$

We have also taken here the continuous limit $l\to 0$, which does not lead to any divergence.

We concentrate our analysis on the 1D case and we make the link with existing results in the literature. These existing results deal with the asymptotic behavior of g_1 for large r, where r is the absolute value of the spatial coordinate. At zero temperature, we find for $r\gg\xi$:

$$g_1(r)\simeq\rho\left(\frac{r_1}{r}\right)^{1/2\pi\rho\xi}, \tag{185}$$

with $r_1=e^{2-C}\xi/4\simeq 1.037\xi$ where $C=0.577\,21\ldots$ is Euler's constant [36]. This reproduces a result obtained in a nonexplicit way in [37]. At a finite temperature, g_1/ρ is the exponential of an integral of the form

$$\int_0^{+\infty}\frac{A(k)}{k^2}[1-\cos(kr)], \tag{186}$$

where the function $A(k)$ is a regular and even function of k, therefore behaving quadratically with k around $k=0$ [38]. Writing $A(k)$ as $[A(k)-A(0)]+A(0)$ and splitting the integral, accordingly one obtains for r much larger than both ξ and λ,

$$\ln[g_1(r)/\rho]=\frac{r}{l_c}+K+o(1/r^n), \tag{187}$$

where the coherence length $l_c=\rho\lambda^2/\pi$ coincides with the one of [39] and the constant K is given by

$$K=\int_0^{+\infty}\frac{A(k)-A(0)}{k^2}. \tag{188}$$

Since $A(k)$ is even one can show by repeated integration by parts that the remainder in Eq. (187) tends to 0 faster than any power law, contrary to what is stated in [39].

Of course our formula gives access to g_1 for any value of the distance. This is illustrated in Fig. 1 where we have plotted the logarithm of g_1 as function of r/ξ for various temperatures.

As a consequence, we can, for example, calculate the momentum distribution of the atoms:

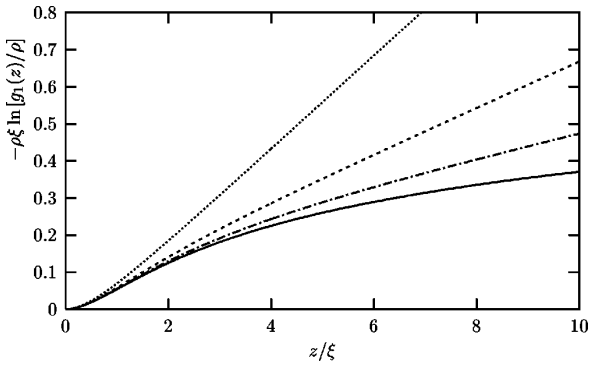


FIG. 1. First order correlation function of the field $g_1(z)$ for a repulsive 1D Bose gas in the thermodynamic limit. The different curves correspond to various ratios of the temperature to the chemical potential: $k_BT/\mu=0$ (solid line), 1/15 (dot-dashed line), 1/8 (dashed line), 1/4 (dotted line). We plot the logarithm of $g_1(z)$ multiplied by the parameter $\rho\xi$, where ρ is the 1D spatial density and $\xi=\hbar/\sqrt{m\mu}$ is the healing length, so that we obtain a quantity depending only on z/ξ and k_BT/μ in the weakly interacting limit.

$$\Pi(p)=2\int_0^{+\infty}dr\,g_1(r)\cos(pr/\hbar) \tag{189}$$

normalized here as $\int dp\,\Pi(p)=2\pi\hbar\rho$ so that $\Pi(p)$ is dimensionless. This is illustrated in Fig. 2 where we have plotted the momentum distribution for various temperatures and for $\rho\xi=10$. Using integration by parts we can show that the behavior of Π for large p is related to the fact that the third order derivative of g_1 in $r=0^+$ does not vanish:

$$\Pi(p)\sim\frac{2\hbar^4 g_1^{(3)}(0^+)}{p^4}\quad\text{with}\quad g_1^{(3)}(0^+)=\mu^2m^2/(2\hbar^4). \tag{190}$$

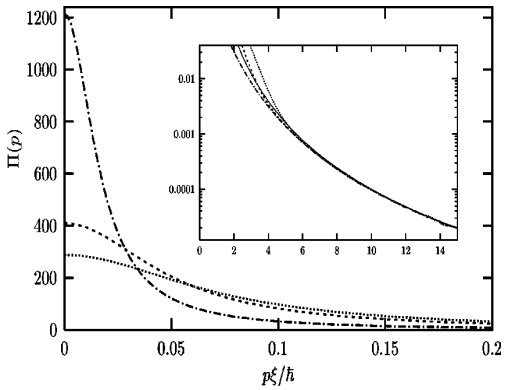


FIG. 2. Momentum distribution of a repulsive 1D Bose gas in the thermodynamic limit. $\Pi(p)$ is normalized as $\int dp\Pi(p)=2\pi\hbar\rho$ where ρ is the 1D spatial density so that $\Pi(p)$ is dimensionless. We plot $\Pi(p)$ as a function of $p\xi/\hbar$ for various ratios of the temperature to the chemical potential: $k_BT/\mu=1/3$ (dot-dashed lines), 1 (dashed lines), 10/7 (dotted lines). We have taken $\rho\xi=10\gg 1$ where $\xi=\hbar/\sqrt{m\mu}$ is the healing length. The solid line is the large p limit: $(\hbar/p\xi)^4$. The inset is a magnification.

This prediction, valid at zero or finite temperature, agrees with the weak interaction limit of a recently obtained exact result based on the Bethe ansatz [40]. At zero temperature we find that the momentum distribution diverges at $p=0$ as

$$\Pi(p)\sim\frac{\hbar\rho\pi\nu}{p}(r_1 p/\hbar)^{\nu}, \tag{191}$$

where $\nu=1/(2\pi\rho\xi)\ll 1$.

CONCLUSION

We have studied the thermal equilibrium of weakly interacting degenerate Bose gases in the regime of weak density fluctuations, the so-called quasicondensate regime. The method can be considered as a Bogoliubov method in the density-phase representation of the field operator.

In the first step one discretizes the real space in cells of size l: l is small enough that the macroscopic properties of the gas are not affected by the discretization, and l large enough that each cell contains on the average a large number of particles. The macroscopic occupation of each cell allows one to give a precise definition of the phase operator, following the method of Girardeau and Arnowitt [18].

In a second step one performs a systematic expansion of the full Hamiltonian in terms of two small parameters, the relative density fluctuations inside a cell and the phase change over a grid cell. This procedure leads to an exact expansion of the observables of the gas in the regime of weak interactions and low density fluctuations, in 1D, 2D, and 3D. In particular, it is free of any ultraviolet or infrared divergences and exactly matches the usual Bogoliubov predictions when the gas contains a true Bose-Einstein condensate.

As a first application of the general formalism, we have given in this paper formulas for the equation of state of the gas, the ground state energy, and the first order and second order correlation functions of the field. We have applied these formulas to the spatially homogeneous case in 1D, 2D, and 3D, recovering in this way known results, but obtaining also other results, like the full position dependence of the first order correlation function of the field.

ACKNOWLEDGMENTS

We acknowledge useful discussions with Iacopo Carusotto, Gora Shlyapnikov, Dimitri Gangardt, and Gordon Baym. Laboratoire Kastler Brossel is a research unit of Ecole Normale Supérieure and Université Paris 6, associated with CNRS.

APPENDIX A: EXPANSION OF THE HAMILTONIAN

As explained in Sec. II B we expand the Hamiltonian (28) up to third order in powers of the small parameters ϵ_1 and ϵ_2 defined in Eqs. (33) and (35). This will produce terms $H^{(n_1,n_2)}$ of order $\epsilon_1^{n_1}\epsilon_2^{n_2}$ with $n_1+n_2\leqslant 3$. The expansion of the potential energy part $H_{\rm pot}$ defined in Eq. (30) is very simple as it involves only the operator giving the density. The only point is to realize that the term $1/l^D$ is ϵ_1^2 times smaller than the zeroth order density ρ_0. This leads to

$$H_{\rm pot}^{(0,0)}=\sum_{\mathbf{r}} l^D\rho_0\left[U(\mathbf{r})-\mu+\frac{g_0}{2}\rho_0\right], \tag{A1}$$

$$H_{\rm pot}^{(1,0)}=\sum_{\mathbf{r}} l^D\delta\hat{\rho}[U(\mathbf{r})-\mu+g_0\rho_0], \tag{A2}$$

$$H_{\rm pot}^{(2,0)}=\sum_{\mathbf{r}} l^D\frac{g_0}{2}\left[\delta\hat{\rho}^2-\frac{\rho_0}{l^D}\right], \tag{A3}$$

$$H_{\rm pot}^{(3,0)}=-\sum_{\mathbf{r}}\frac{g_0}{2}\delta\hat{\rho}. \tag{A4}$$

The expansion of the kinetic energy part (31) is more complicated as it involves also the phase operator $\hat{\theta}$, which, furthermore, does not commute with $\delta\hat{\rho}$. An expression slightly more convenient than Eq. (31) can be given for the kinetic energy. Because of the periodic boundary conditions one can freely shift the summation variable in the term of Eq. (31) involving $\hat{\rho}_{-j}$, so that

$$H_{\rm kin}=-\frac{\hbar^2}{2ml^2}\sum_{\mathbf{r},j} l^D\{[\sqrt{\hat{\rho}}e^{i(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})}\sqrt{\hat{\rho}_{+j}}+\text{H.c.}]-2\hat{\rho}\}. \tag{A5}$$

The calculation to zeroth order in ϵ_2 can be done first easily: using the expansion (37) to zeroth order, we get from Eq. (31) to all orders in ϵ_1,

$$H_{\rm kin}^{(\leqslant+\infty,0)}=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\mathbf{r}} l^D\sqrt{\hat{\rho}}\Delta\sqrt{\hat{\rho}}. \tag{A6}$$

This involves a function of $\hat{\rho}$ only that it is easily expanded in powers of ϵ_1 using Eq. (34). A simplification occurs after summation over the lattice, as the matrix Δ is symmetric for the considered periodic boundary conditions:

$$\sum_{\mathbf{r}} u\Delta v=\sum_{\mathbf{r}}(\Delta u)v, \tag{A7}$$

where u and v are arbitrary functions on the lattice. This leads to

$$H_{\rm kin}^{(0,0)}=-\frac{\hbar^2}{2m}l^D\sum_{\mathbf{r}}\sqrt{\rho_0}\Delta\sqrt{\rho_0}, \tag{A8}$$

$$H_{\rm kin}^{(1,0)}=-\frac{\hbar^2}{2m}l^D\sum_{\mathbf{r}}\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}\Delta\sqrt{\rho_0}, \tag{A9}$$

$$H_{\rm kin}^{(2,0)}=-\frac{\hbar^2}{2m}l^D\sum_{\mathbf{r}}\left[\frac{\delta\hat{\rho}}{4\sqrt{\rho_0}}\Delta\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}-\frac{\delta\hat{\rho}^2}{4\rho_0^{3/2}}\Delta\sqrt{\rho_0}\right], \tag{A10}$$

$$H_{\rm kin}^{(3,0)}=-\frac{\hbar^2}{2m}l^D\sum_{\mathbf{r}}\left[\frac{1}{8}\frac{\delta\hat{\rho}^3}{\rho_0^{5/2}}\Delta\sqrt{\rho_0}-\frac{1}{8}\frac{\delta\hat{\rho}^2}{\rho_0^{3/2}}\Delta\frac{\delta\hat{\rho}}{\rho_0^{1/2}}\right]. \tag{A11}$$

The second order term of vanishing order in ϵ_1 is also immediately obtained:

$$H_{\rm kin}^{(0,2)}=\frac{\hbar^2}{2ml^2}l^D\sum_{\mathbf{r},j}\sqrt{\rho_0\rho_{0,+j}}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})^2. \tag{A12}$$

The last second order quantity to calculate is $H_{\rm kin}^{(1,1)}$, which is first order in ϵ_1 and first order in ϵ_2. There are four terms, two involving $\hat{\theta}_{+j}$ and two being their Hermitian conjugates. One can then collect the terms to form commutators:

$$H_{\rm kin}^{(1,1)}=-\frac{\hbar^2}{2ml^2}l^D\sum_{\mathbf{r},j}\frac{i}{2}\left(\frac{\rho_0}{\rho_{0,+j}}\right)^{1/2}[\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta},\delta\hat{\rho}_{+j}]$$
$$-\frac{i}{2}\left(\frac{\rho_{0,+j}}{\rho_0}\right)^{1/2}[\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta},\delta\hat{\rho}]. \tag{A13}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{4ml^2}\sum_{\mathbf{r},j}\left[\left(\frac{\rho_{0,+j}}{\rho_0}\right)^{1/2}+\left(\frac{\rho_0}{\rho_{0,+j}}\right)^{1/2}\right], \tag{A14}$$

where we have used the commutation relation of $\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$ [see Eq. (20)].

We collect all the second order *c*-number contributions to the Hamiltonian H in a single energy functional of the density profile of the quasicondensate,

$$E_2[\rho_0]=-\frac{g_0}{2}\sum_{\mathbf{r}}\rho_0-\frac{\hbar^2}{4ml^2}\sum_{\mathbf{r},j}\left[\left(\frac{\rho_{0,+j}}{\rho_0}\right)^{1/2}+\left(\frac{\rho_0}{\rho_{0,+j}}\right)^{1/2}\right]. \tag{A15}$$

The technique used to calculate $H_{\rm kin}^{(1,1)}$ can be extended to the calculation of $H_{\rm kin}^{(2,1)}$. There are now three terms and their Hermitian conjugates. Two of these terms, when combined with their Hermitian conjugates, form a commutator that is calculated according to Eq. (20). The third term and its Hermitian conjugate involve the expression

$$\delta\hat{\rho}(\hat{\theta}_+-\hat{\theta})\delta\hat{\rho}_+-\delta\hat{\rho}_+(\hat{\theta}_+-\hat{\theta})\delta\hat{\rho}$$
$$=\delta\hat{\rho}[\hat{\theta}_+,\delta\hat{\rho}_+]-[\delta\hat{\rho},\hat{\theta}]\delta\hat{\rho}_+, \tag{A16}$$

which is a sum of two commutators, easy to evaluate. This leads to

$$H_{\rm kin}^{(2,1)}=\frac{\hbar^2}{8m}\sum_{\mathbf{r}}\frac{\delta\hat{\rho}}{\rho_0}(\rho_0^{-1/2}\Delta\rho_0^{1/2}-\rho_0^{1/2}\Delta\rho_0^{-1/2}). \tag{A17}$$

To calculate $H_{\rm kin}^{(1,2)}$ we first evaluate

$$H_{\rm kin}^{(\leqslant+\infty,2)}=\frac{\hbar^2}{4ml^2}\sum_{\mathbf{r},j}l^D[\sqrt{\hat{\rho}}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})^2\sqrt{\hat{\rho}_{+j}}+\text{H.c.}] \tag{A18}$$

and we expand to first order in $\delta\hat{\rho}$, which leads to a sum of terms that are not individually Hermitian. We then use the commutation relation (20) to produce Hermitian terms, e.g.,

$$\delta\hat{\rho}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})^2=(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})\delta\hat{\rho}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})-\frac{i}{l^D}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta}). \tag{A19}$$

The last term of the right-hand side of this expression is anti-Hermitian and does not contribute to the final result

$$H_{\rm kin}^{(1,2)}=\frac{\hbar^2}{4ml^2}\sum_{\mathbf{r},j}l^D(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})\left(\frac{\rho_{0,+j}^{1/2}}{\rho_0^{1/2}}\delta\hat{\rho}+\frac{\rho_0^{1/2}}{\rho_{0,+j}^{1/2}}\delta\hat{\rho}_{+j}\right)$$
$$\times(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta}). \tag{A20}$$

Finally, $H_{\rm kin}^{(0,1)}$ and $H_{\rm kin}^{(0,3)}$ vanish as the odd order expansion of $\exp[i(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})]$ is anti-Hermitian.

APPENDIX B: CORRECTIONS TO THE EQUATIONS OF MOTION DUE TO H_3

The Hamiltonian H_3 gives rise to quadratic corrections to the equations of motion for $\delta\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$. In this appendix, these corrections are calculated explicitly and the thermal average is taken over the equations of motion with the Hamiltonian H_2+H_3 for the linear part and the Hamiltonian H_2 for the quadratic corrections. This allows us to calculate the first correction to the mean density due to H_3.

The corrections to the equation of motion for the density fluctuations are given by

$$\hbar\partial_t\delta\hat{\rho}|_{H_3}=\frac{\hbar^2}{4ml^2}\sum_j\left[\left\{\hat{\theta}-\hat{\theta}_{+j},\left(\frac{\rho_{0,+j}}{\rho_0}\right)^{1/2}\delta\hat{\rho}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\left(\frac{\rho_0}{\rho_{0,+j}}\right)^{1/2}\delta\hat{\rho}_{+j}\right\}+(+j\leftrightarrow-j)\right], \tag{B1}$$

where $\{A,B\}$ stands for the anticommutator $AB+BA$ of two operators. When we take the average with the Hamiltonian H_2, we use the explicit modal expansion of $\delta\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$ given by Eq. (56). The operator $\hat{Q}$ disappears since Eq. (B1) involves only differences of $\hat{\theta}$. Terms with $\hat{P}$ also disappear since $\langle\hat{P}\rangle_2=0$. The expectation value of the product $\hat{\theta}(\mathbf{r})\delta\hat{\rho}(\mathbf{r}')$, where $\hat{\theta}$ is written without $\hat{Q}$ and $\delta\hat{\rho}$ is written without $\hat{P}$, is actually purely imaginary: as u_s and v_s can be chosen to be real, $\theta_s^*=-\theta_s$ [see Eq. (57)]. Since $\partial_t\langle\delta\hat{\rho}\rangle$ is real, all imaginary contributions to it have to cancel so that the corrections to the motion of $\langle\delta\hat{\rho}\rangle$ due to H_3 finally vanish when we take the thermal average:

$$\hbar\partial_t\langle\delta\hat{\rho}\rangle|_{H_3}=0. \tag{B2}$$

The corrections to the equation of motion for $\hat{\theta}$ are more involved:

$$\hbar\partial_t\hat{\theta}|_{H_3}=\frac{1}{2\sqrt{\rho_0}}\Bigg[-\frac{\hbar^2}{4m\rho_0}\delta\hat{\rho}\Delta\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}\right)+\frac{3\hbar^2}{8m\rho_0^2}\delta\hat{\rho}^2\Delta(\sqrt{\rho_0})-\frac{\hbar^2}{8m}\Delta\left(\frac{\delta\hat{\rho}^2}{\rho_0^{3/2}}\right)-\frac{\hbar^2}{2ml^2}\times\sum_j\,[\sqrt{\rho_{0,+j}}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})^2+\sqrt{\rho_{0,-j}}(\hat{\theta}_{-j}-\hat{\theta})^2]+\frac{g_0\sqrt{\rho_0}}{l^D}-\frac{\hbar^2}{4ml^D\sqrt{\rho_0}}(\rho_0^{-1/2}\Delta\rho_0^{1/2}-\rho_0^{1/2}\Delta\rho_0^{-1/2})\Bigg]. \quad \text{(B3)}$$

Fortunately, we can use the linear equations of motion (46),(47) to significantly simplify the above equation of motion. We rewrite the first term in square brackets of Eq. (B3) as

$$-\frac{\hbar^2}{4m\rho_0}\delta\hat{\rho}\Delta\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}\right)=-\frac{\delta\hat{\rho}}{2\rho_0}\left[(U-\mu+3g_0\rho_0)\left(\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}\right)+2\sqrt{\rho_0}\hbar\partial_t\hat{\theta}\right]. \quad \text{(B4)}$$

The second term in square brackets of Eq. (B3) gives, as $\sqrt{\rho_0}$ solves the Gross-Pitaevskii equation,

$$\frac{3\hbar^2}{8m\rho_0^2}\delta\hat{\rho}^2\Delta(\sqrt{\rho_0})=\frac{3\delta\hat{\rho}^2}{4\rho_0^{3/2}}(U-\mu+g_0\rho_0). \quad \text{(B5)}$$

The sum of Eqs. (B4) and (B5) and the third term in square brackets of Eq. (B3) leads to

$$\frac{1}{4}\left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}+U-\mu+g_0\rho_0\right)\left(\frac{\delta\hat{\rho}^2}{\rho_0^{3/2}}\right)-g_0\frac{\delta\hat{\rho}^2}{\sqrt{\rho_0}}-\hbar(\partial_t\hat{\theta})\frac{\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}. \quad \text{(B6)}$$

To rewrite the fourth term in square brackets of Eq. (B3), it is convenient to use the following identity:

$$\begin{aligned}&\sum_j\,\sqrt{\rho_{0,+j}}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})^2+\sqrt{\rho_{0,-j}}(\hat{\theta}_{-j}-\hat{\theta})^2\\&\quad+2\hat{\theta}[\sqrt{\rho_{0,+j}}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})+\sqrt{\rho_{0,-j}}(\hat{\theta}_{-j}-\hat{\theta})]\\&=\sum_j\,\sqrt{\rho_{0,+j}}(\hat{\theta}_{+j}^2-\hat{\theta}^2)+\sqrt{\rho_{0,-j}}(\hat{\theta}_{-j}^2-\hat{\theta}^2)\\&=l^2[\Delta(\sqrt{\rho_0}\hat{\theta}^2)-\hat{\theta}^2\Delta(\sqrt{\rho_0})],\end{aligned} \quad \text{(B7)}$$

leading to

$$\begin{aligned}&\sum_j\,\sqrt{\rho_{0,+j}}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})^2+\sqrt{\rho_{0,-j}}(\hat{\theta}_{-j}-\hat{\theta})^2\\&\quad=l^2[\hat{\theta}^2\Delta\sqrt{\rho_0}-2\hat{\theta}\Delta(\sqrt{\rho_0}\hat{\theta})+\Delta(\sqrt{\rho_0}\hat{\theta}^2)].\end{aligned} \quad \text{(B8)}$$

Using this equality, the Gross-Pitaevskii equation (41), and the equation of motion (47), the fourth term in square brackets of Eq. (B3) can be written as

$$-\frac{\hbar^2}{2ml^2}\sum_j\,[\sqrt{\rho_{0,+j}}(\hat{\theta}_{+j}-\hat{\theta})^2+\sqrt{\rho_{0,-j}}(\hat{\theta}_{-j}-\hat{\theta})^2]=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U-\mu+g_0\rho_0\right)(\sqrt{\rho_0}\hat{\theta}^2)-\hbar\hat{\theta}\frac{\partial_t\delta\hat{\rho}}{\sqrt{\rho_0}}. \quad \text{(B9)}$$

The sixth (and last) term in square brackets of Eq. (B3) can also be transformed using the Gross-Pitaevskii equation (41):

$$-\frac{\hbar^2}{4ml^D\sqrt{\rho_0}}(\rho_0^{-1/2}\Delta\rho_0^{1/2}-\rho_0^{1/2}\Delta\rho_0^{-1/2})=-\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U-\mu+g_0\rho_0\right)\left(\frac{1}{2l^D\sqrt{\rho_0}}\right). \quad \text{(B10)}$$

This leads finally to a rewriting of the thermal average of Eq. (B3) as

$$2\sqrt{\rho_0}\hbar\langle\partial_t\hat{\theta}\rangle|_{H_3}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U-\mu+g_0\rho_0\right)\times\left(\frac{\langle\delta\hat{\rho}^2\rangle_2}{4\rho_0^{3/2}}+\sqrt{\rho_0}\langle\hat{\theta}^2\rangle_2-\frac{1}{2l^D\sqrt{\rho_0}}\right)-g_0\frac{\langle\delta\hat{\rho}^2\rangle_2-\rho_0/l^D}{\sqrt{\rho_0}}-\frac{\hbar\partial_t\langle\hat{\theta}\delta\hat{\rho}\rangle_2}{\sqrt{\rho_0}}. \quad \text{(B11)}$$

The last term of this expression can be calculated using Eq. (56). The harmonic modes do not contribute since the expectation value of products of $\hat{b}_s$ and $\hat{b}_s^\dagger$ is time independent. We are left with

$$\partial_t\langle\hat{Q}\hat{P}\rangle_2=\partial_t\left\langle\hat{Q}(0)\hat{P}+t\frac{\mu_0'}{\hbar}\hat{P}^2\right\rangle_2=\frac{\mu_0'}{\hbar}\langle\hat{P}^2\rangle_2, \quad \text{(B12)}$$

which gives

$$-\frac{\hbar\partial_t\langle\hat{\theta}\delta\hat{\rho}\rangle_2}{\sqrt{\rho_0}}=2\mu_0'\langle\hat{P}^2\rangle_2\partial_{N_0}\sqrt{\rho_0}. \quad \text{(B13)}$$

As a conclusion, the quadratic correction to the first equation of motion can be written as in Eq. (60) if one uses the identities

$$\hat{B}^\dagger\hat{B}=\frac{\delta\hat{\rho}^2}{4\rho_0}+\rho_0\hat{\theta}^2-\frac{1}{2l^D},$$

$$\frac{\delta\hat{\rho}^2}{\sqrt{\rho_0}} = \sqrt{\rho_0}(\hat{B}+\hat{B}^\dagger)^2$$

$$= \sqrt{\rho_0}\left(2\hat{B}^\dagger\hat{B}+\hat{B}^2+\hat{B}^{\dagger 2}+\frac{1}{l^D}\right). \quad \text{(B14)}$$

APPENDIX C: THE MEAN VALUE OF $\partial_t\hat{\theta}$ VANISHES AT EQUILIBRIUM

As the field degree of freedom $\hat{Q}$, that is, the global phase of the field, is not subject to a restoring force in H_2, it is not totally obvious that the perturbation H_3 cannot set it into permanent motion. We therefore check this point explicitly here.

The first step is to calculate the mean value of $\hat{P}$ to first order in H_3. We approximate the unnormalized density operator of the gas at thermal equilibrium to first order in H_3 using perturbation theory:

$$\sigma = e^{-\beta(H_2+H_3)} = e^{-\beta H_2} - \int_0^\beta d\tau e^{-(\beta-\tau)H_2} H_3 e^{-\tau H_2} + \cdots. \quad \text{(C1)}$$

$\hat{P}$ commutes with H_2 and has a vanishing mean value in the thermal state corresponding to H_2 so that, to first order in H_3,

$$\langle\hat{P}\rangle_3 = -\langle\beta\hat{P}H_3\rangle_2. \quad \text{(C2)}$$

The Hamiltonian H_3 is a polynomial of degree 3 in $\hat{P}$:

$$H_3 = A_0 + A_1\hat{P} + A_2\hat{P}^2 + A_3\hat{P}^3, \quad \text{(C3)}$$

where the A_i are still operators with respect to the harmonic oscillator variables b_s. This leads to

$$\langle\hat{P}\rangle_3 = -\beta[\langle A_1\rangle_2\langle\hat{P}^2\rangle_2 + \langle A_3\rangle_2\langle\hat{P}^4\rangle_2]. \quad \text{(C4)}$$

From Wick's theorem, $\langle\hat{P}^4\rangle_2 = 3\langle\hat{P}^2\rangle_2^2$.

In the second step we calculate $\langle d\hat{Q}/dt\rangle$ to first order in H_3:

$$\langle d\hat{Q}/dt\rangle \simeq \langle\partial_{\hat{P}}(H_2+H_3)\rangle_3 \simeq \mu_0'\langle\hat{P}\rangle_3 + \langle A_1\rangle_2 + 3\langle A_3\rangle_2\langle\hat{P}^2\rangle_2, \quad \text{(C5)}$$

where the terms coming from $\partial_{\hat{P}}H_3$ are calculated in the thermal state for H_2 since they are already first order in the perturbation. From the value of $\langle\hat{P}\rangle_3$ obtained from Eq. (C4) and from Eq. (61) we obtain the desired result:

$$\langle d\hat{Q}/dt\rangle_3 = 0 \quad \text{(C6)}$$

to first order in H_3.

APPENDIX D: AN EQUATION FOR $\{\hat{\alpha},\hat{\Lambda}\}$

In this appendix, we derive the partial differential equation (91). We first note that $\hat{B}_n$, being a sum of eigenmodes of the operator $\mathcal{L}_{\rm GP}$, obeys the differential equation for the evolution governed by H_2:

$$i\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\hat{B}_n\\ \hat{B}_n^\dagger\end{pmatrix} = \mathcal{L}_{\rm GP}\begin{pmatrix}\hat{B}_n\\ \hat{B}_n^\dagger\end{pmatrix}. \quad \text{(D1)}$$

We project this equation orthogonally to ϕ_0 and along ϕ_0, so that we get the quantum analog of Eqs. (E9) and (E10) of [26], with the simplification that $\phi_0(\mathbf{r})$ is real:

$$i\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\hat{\Lambda}\\ \hat{\Lambda}^\dagger\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathcal{Q} & 0\\ 0 & \mathcal{Q}\end{pmatrix}\mathcal{L}_{\rm GP}\begin{pmatrix}\hat{\Lambda}\\ \hat{\Lambda}^\dagger\end{pmatrix} + (\hat{\alpha}+\hat{\alpha}^\dagger)\begin{pmatrix}\mathcal{Q}g_0\rho_0\phi_0\\ -\mathcal{Q}g_0\rho_0\phi_0\end{pmatrix}, \quad \text{(D2)}$$

$$i\hbar\frac{d\hat{\alpha}}{dt} = l^D\sum_{\mathbf{r}} g_0\rho_0\phi_0(\hat{B}_n+\hat{B}_n^\dagger)$$

$$= l^D\sum_{\mathbf{r}} g_0\rho_0\phi_0(\hat{\Lambda}+\hat{\Lambda}^\dagger). \quad \text{(D3)}$$

We have introduced the projection matrix

$$\langle\mathbf{r}|\mathcal{Q}|\mathbf{r}'\rangle = \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} - l^D\phi_0(\mathbf{r})\phi_0(\mathbf{r}'). \quad \text{(D4)}$$

As $\hat{\alpha}$ is anti-Hermitian, the source term in Eq. (D2) vanishes and one can replace $\hat{B}_n$ by $\hat{\Lambda}$ in Eq. (D3).

We use these two equations of motion to calculate the first order time derivative of $A(\mathbf{r}) \equiv \langle\{\hat{\alpha},\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\}\rangle_2$. We do not give the intermediate result. As A is real here, we have the property

$$\langle\{\hat{\alpha},\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\}\rangle_2 = -\langle\{\hat{\alpha},\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\}\rangle_2. \quad \text{(D5)}$$

As $\hat{\Lambda}$ is orthogonal to ϕ_0 one has

$$\mathcal{Q}A = A. \quad \text{(D6)}$$

All this leads to Eq. (91).

APPENDIX E: INTERPRETATION OF χ IN THE NUMBER CONSERVING BOGOLIUBOV APPROACH

We assume here that the gas is a quasipure condensate so that ϕ_0 is now the condensate wave function in the Gross-Pitaevskii approximation. We then show that $\chi(\mathbf{r})/N_0$, where χ is defined in Eq. (94), essentially coincides with the lowest order deviation of the exact condensate wave function from the Gross-Pitaevskii prediction ϕ_0. This deviation was calculated in [15].

We split χ into a component orthogonal to ϕ_0 and a component collinear to ϕ_0:

$$\chi(\mathbf{r}) = \gamma\phi_0(\mathbf{r}) + \chi_\perp(\mathbf{r}). \quad \text{(E1)}$$

The component γ has a simple physical interpretation: we sum Eq. (95) over $\mathbf{r}$ after multiplication by l^D. If we omit the grand canonical term (absent in the canonical treatment of [15]) we obtain

$$N = N_0 + 2\gamma + \delta N, \tag{E2}$$

where

$$\delta N \equiv l^D \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{\Lambda}^\dagger \hat{\Lambda} \rangle_2 \tag{E3}$$

exactly coincides with the mean number of noncondensed particles predicted in [15]. The physical interpretation of 2γ is then simple:

$$\delta N_0 \equiv 2\gamma \tag{E4}$$

is the correction to apply to the pure condensate prediction for the number of condensate particles in order to recover the correct Bogoliubov prediction. Applying to Eq. (94) the matrix $\mathcal{Q}$ (D4) projecting orthogonally to ϕ_0 we obtain

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U + g_0\rho_0 - \mu \right] \chi_\perp + 2\mathcal{Q} g_0 \rho_0 \chi_\perp + \mathcal{Q}\left(2 g_0 \rho_0 \gamma \phi_0 + \frac{1}{2} S \right) = 0. \tag{E5}$$

We modify slightly the form of the source term S, eliminating the anticommutator:

$$\{\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}'), \hat{\Lambda}(\mathbf{r})\} = 2\hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) + \frac{1}{l^D}\langle \mathbf{r}|\mathcal{Q}|\mathbf{r}'\rangle. \tag{E6}$$

This leads to the system

$$\begin{pmatrix} \mathcal{Q} & 0 \\ 0 & \mathcal{Q} \end{pmatrix} \mathcal{L}_{\mathrm{GP}} \begin{pmatrix} \chi_\perp \\ \chi_\perp \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathcal{Q} S_{\mathrm{eff}} \\ -\mathcal{Q} S_{\mathrm{eff}} \end{pmatrix} = 0 \tag{E7}$$

with the effective source term

$$S_{\mathrm{eff}}(\mathbf{r}) = g_0\rho_0(\mathbf{r})\phi_0(\mathbf{r})(\delta N_0 - 1) + g_0 N_0 \phi_0(\mathbf{r}) \times [2\langle \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\rangle_2 + \langle \hat{\Lambda}^2(\mathbf{r})\rangle_2] - l^D \sum_{\mathbf{r}'} g_0 \rho_0(\mathbf{r}')\phi_0(\mathbf{r}')\langle [\hat{\Lambda}(\mathbf{r}') + \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}')]\hat{\Lambda}(\mathbf{r})\rangle_2, \tag{E8}$$

where we used the fact that here $\langle \hat{\Lambda}^2 \rangle_2 = \langle \hat{\Lambda}^{\dagger 2} \rangle_2$ since the condensate wave function is real. Equation (E7) is the steady version of Eq. (95) of [15], which gives N times the correction to the condensate wave function, and the source term (E8) exactly coincides with the one of Eq. (96) of [15] if one realizes that $N = N_0$, so that $\delta N_0 = -\delta N$, in the systematic expansion used in [15].

APPENDIX F: CORRECTIONS TO g_1 DUE TO THE CUBIC HAMILTONIAN

We calculate the corrections to the first order correlation function due to H_3 using the perturbative formula (143). A first remark is that

$$H_3(\tau) \equiv e^{\tau H_2} H_3 e^{-\tau H_2} \tag{F1}$$

is still cubic in the operators $\hat{b}_s$, since one has

$$e^{\tau H_2} \hat{b}_s e^{-\tau H_2} = e^{-\tau \epsilon_s} \hat{b}_s, \tag{F2}$$

$$e^{\tau H_2} \hat{b}_s^\dagger e^{-\tau H_2} = e^{\tau \epsilon_s} \hat{b}_s^\dagger, \tag{F3}$$

where ϵ_s is the energy of the Bogoliubov mode s. The second step is to use Wick's theorem to calculate the expectation values in the thermal state corresponding to the Hamiltonian H_2. One can derive the general formulas

$$\langle A_1 A_2 A_3 e^{i\Delta\theta}\rangle_2 = [\langle A_1 A_2 A_3 i\Delta\theta\rangle_2 + \langle A_1 i\Delta\theta\rangle_2 \langle A_2 i\Delta\theta\rangle_2 \langle A_3 i\Delta\theta\rangle_2] \times e^{-\langle (\Delta\theta)^2\rangle_2/2}, \tag{F4}$$

$$\langle A_1 A_2 A_3 A_4 e^{i\Delta\theta}\rangle_2 = \left\{ \langle A_1 A_2 A_3 A_4\rangle_2 \left[1 + \frac{1}{2}\langle (\Delta\theta)^2\rangle_2 \right] - \frac{1}{2}\langle A_1 A_2 A_3 A_4 (\Delta\theta)^2\rangle_2 + \langle A_1 i\Delta\theta\rangle_2 \langle A_2 i\Delta\theta\rangle_2 \langle A_3 i\Delta\theta\rangle_2 \times \langle A_4 i\Delta\theta\rangle_2 \right\} e^{-\langle (\Delta\theta)^2\rangle_2/2}, \tag{F5}$$

where the A_i are linear in $\delta\hat{\rho}$ and $\hat{\theta}$ and have a vanishing mean value. A last point is to realize that some of the terms obtained contain a larger number of factors equal to $\Delta\theta$ than other ones. Since $\Delta\theta$ scales as $1/\sqrt{\rho_0}$ [see, e.g., the expression of $\hat{\theta}$ in terms of the mode functions u_s, v_s in Eq. (57)], the terms with an excess of $\Delta\theta$ factors are higher order in the expansion and are therefore negligible. Note that, strictly speaking, this argument is correct provided that each factor $\langle A_i \Delta\theta\rangle_2$ remains bounded whatever the distance from $\mathbf{0}$ to $\mathbf{r}$. This can be checked to be indeed the case: from the form of H_3 one sees that A_i is either $\delta\hat{\rho}$ or the phase difference between two neighboring points of the grid. One can therefore use the approximate identities

$$\langle A_1 A_2 A_3 e^{i\Delta\theta}\rangle_2 \simeq \langle A_1 A_2 A_3 i\Delta\theta\rangle_2 e^{-\langle (\Delta\theta)^2\rangle_2/2}, \tag{F6}$$

$$\langle A_1 A_2 A_3 A_4 e^{i\Delta\theta}\rangle_2 \simeq \langle A_1 A_2 A_3 A_4\rangle_2 e^{-\langle (\Delta\theta)^2\rangle_2/2}. \tag{F7}$$

This immediately leads to the identities (144) and (145).

[1] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. P. Rosenband, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
[2] F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, and C. Salomon, Phys. Rev. Lett. **87**, 080403 (2001).
[3] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **22**, 1133 (1966).
[4] P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
[5] Y. Castin, R. Dum, E. Mandonnet, A. Minguzzi, and I. Carusotto, J. Mod. Opt. **47**, 2671 (2000).
[6] I. Carusotto and Y. Castin, J. Phys. B **34**, 4589 (2001).
[7] V. N. Popov, Theor. Math. Phys. **11**, 565 (1972); *Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics* (Reidel, Dordrecht, 1983), Chap. 6.
[8] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, Phys. Rev. Lett. **85**, 3745 (2000).
[9] D. S. Petrov, M. Holzmann, and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. **84**, 2551 (2000).
[10] T.-L. Ho and M. Ma, J. Low Temp. Phys. **115**, 61 (1999).
[11] S. Dettmer, D. Hellweg, P. Ryytty, J. J. Arlt, W. Ertmer, K. Sengstock, D. S. Petrov, and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. **87**, 160406 (2001).
[12] F. Gerbier, S. Richard, J. H. Thywissen, M. Hugbart, P. Bouyer, and A. Aspect, e-print cond-mat/0210206.
[13] N. Bogoliubov, J. Phys. (Moscow) **11**, 23 (1947).
[14] C. Gardiner, Phys. Rev. A **56**, 1414 (1997).
[15] Y. Castin and R. Dum, Phys. Rev. A **57**, 3008 (1998).
[16] S. I. Shevchenko, Sov. J. Low Temp. Phys. **18**, 223 (1992).
[17] D. F. Walls and G. J. Milburn, *Quantum Optics* (Springer-Verlag, Berlin, 1995), Chap. 28.
[18] M. Girardeau and R. Arnowitt, Phys. Rev. **113**, 755 (1959).
[19] M. Schwartz, Phys. Rev. A **10**, 1858 (1974).
[20] J. O. Andersen, U. Al Khawaja, and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. Lett. **88**, 070407 (2002).
[21] U. Al Khawaja, J. O. Andersen, N. P. Proukakis, and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. A **66**, 013615 (2002).
[22] U. Al Khawaja, J. O. Andersen, N. P. Proukakis, and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. A **66**, 059902 (2002).
[23] W.-C. Wu and A. Griffin, Phys. Rev. A **54**, 4204 (1996).
[24] This can be seen by taking the derivative of Eq. (11) with respect to α.
[25] We note that the same problem of course arises in the continuous version of the theory; in the above reasoning one has to replace $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ by the integral of $\hat{\rho}(\mathbf{r}')$ over a finite volume around the point $\mathbf{r}$.
[26] A. Sinatra, C. Lobo, and Y. Castin, J. Phys. B **35**, 3599 (2002).
[27] M. Lewenstein and Li You, Phys. Rev. Lett. **77**, 3489 (1996).
[28] E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).
[29] M. Gaudin, *La Fonction d'Onde de Bethe* (Masson, Paris, 1983).
[30] V. Liu, Phys. Rev. Lett. **79**, 4056 (1997).
[31] L. P. Pitaevskii and S. Stringari, Phys. Lett. A **235**, 398 (1997).
[32] P. O. Fedichev and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. A **58**, 3146 (1998).
[33] T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. **105**, 1119 (1957).
[34] M. Schick, Phys. Rev. A **3**, 1067 (1971).
[35] D. M. Gangardt and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. **90**, 010401 (2003).
[36] We have used the identity $\int_0^x du\ (1-\cos u)/u = \ln x + C - \mathrm{Ci}(x)$, where the cosine-integral function $\mathrm{Ci}(x)$ tends to zero in the limit $x \to +\infty$.
[37] V. N. Popov, JETP Lett. **31**, 526 (1980).
[38] The trick is to use the rewriting $-\rho A(k)/k^2 = (1+2\overline{v_k^2})(n_k + 1/2) - 1/2$ where $2n_k + 1 = \coth(\beta\epsilon_k/2)$ and $1+2\overline{v_k^2} = (\mu + \hbar^2 k^2/2m)/\epsilon_k$. It is then clear that $A(k)$ can be extended to the domain $k<0$ to form an even C^∞ function of k since one can extend ϵ_k as an odd C^∞ function of k.
[39] M. Schwartz, Phys. Rev. B **15**, 1399 (1977).
[40] M. Olshanii and V. Dunjko, e-print cond-mat/0210629.