

Contribution à la théorie des gaz de fermions froids

Florent Alzetto

▶ **To cite this version:**

Florent Alzetto. Contribution à la théorie des gaz de fermions froids. Gaz Quantiques [cond-mat.quant-gas]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2011. Français. NNT : . tel-00808195

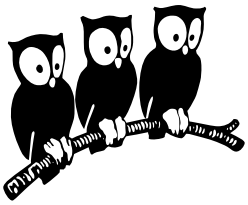
HAL Id: tel-00808195
https://theses.hal.science/tel-00808195

Submitted on 5 Apr 2013

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

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

École Normale Supérieure
Département de Physique
Laboratoire de Physique Statistique



Thèse de doctorat de
l'Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)

Spécialité : Physique Quantique

présentée par

Florent ALZETTO

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

Contribution à la théorie des gaz de fermions froids

Soutenue le 23 septembre 2011 devant le jury composé de :

M. Claude Aslangul	Président du jury
M. Georges Batrouni	Rapporteur
M. Roland Combescot	Co-directeur, invité
M. Thierry Jolicoeur	Examinateur
M. Xavier Leyronas	Directeur
M. Peter Schuck	Examinateur
M. Giancarlo Strinati	Rapporteur

A mon père...

Remerciements

J'ai eu la chance de pouvoir réaliser cette thèse dans un merveilleux endroit qu'est le Laboratoire de Physique Statistique de l'Ecole Normale Supérieure. Je remercie tout ceux que j'ai côtoyé spécialement ceux qui m'y ont accueilli. Je pense à Eric Perez le directeur du LPS ainsi qu'à Jean Michel Raimond et Werner Krauth les directeurs successifs du département de Physique de l'ENS.

Je tiens à remercier Xavier Leyronas mon directeur de thèse, car cela a vraiment été un plaisir de venir au laboratoire grâce à lui. Sa patience, ses connaissances et sa rigueur scientifique m'ont permis d'apprendre énormément. Je le remercie également pour sa disponibilité, sa gentillesse et sa bonne humeur qui rendent toujours les échanges avec lui des plus agréables. Il m'a laissé beaucoup d'autonomie tout en me guidant dans mes travaux. Merci sincèrement pour son encadrement qui a largement dépassé mes espérances.

Je veux aussi remercier Roland Combescot mon codirecteur de thèse. J'ai également beaucoup appris avec lui par sa rigueur et ses grandes connaissances dans beaucoup de domaines. Il a toujours été disponible pour me donner ses conseils et critiques. Toutes ces discussions que nous avons eu m'ont énormément aidé à avancer. Beaucoup d'idées et de résultats de cette thèse sont dues à eux.

J'ai la chance d'avoir un jury d'une grande qualité scientifique et je remercie Claude Aslangul d'être président du jury. Je veux aussi chaleureusement remercier Georges Batrouni et Giancarlo Strinati d'avoir accepté la lourde tache de rapporteur, ainsi que Thierry Jolicoeur et Peter Schuck de bien vouloir être examinateur de ma thèse. Un grand merci à eux pour l'intérêt qu'ils ont manifesté pour cette thèse.

Pour m'avoir fait découvrir les expériences réalisées sur les atomes froids au Laboratoire Kastler Brossel, je remercie tout ceux que j'ai pu y rencontrer. Notamment dans le groupe atomes froids du LKB, merci à Nir Navon et Tarik Yefsah. Beaucoup d'autre personnes ont rendu mon quotidien très agréable. Je remercie mes secrétaires préférées Marie Gefflot, Annie Ribaudeau et Nora Sadaoui. Elles ont toujours été là pour distiller leur bonne humeur et m'aider dans mes démarches administratives. Merci aussi à Zaïr Dissi et Rémy Portier pour leur aide en informatique. Je remercie également les thésards que j'ai côtoyé notamment Sébastien Giraud qui m'a accompagné pendant trois ans dans l'équipe "Théorie des gaz fermioniques ultra froids". Nous avons pu régulièrement discuter de nos projets et j'ai beaucoup appris de lui. Je lui souhaite beaucoup

de succès pour la suite. Je remercie également les "bosons" de la DC21 Laetitia Gauvin, Antoine Gerschenfeld, Félix Hartmann et Marc Santolini et leur souhaite à tous une bonne continuation. Je ne peux oublier la team vélo pour les nombreux kilomètres de route avalés : un grand merci à Arnaud Arvengas, Sébastien Balibard, Carlo Barbieri, Etienne Bernard, Ariel Haziot et Xavier Rojas...bonne route ! Pour finir, je remercie bien évidemment la "mafia" du café avec qui j'ai passé quasiment toutes mes pauses...Vitor Sessak et Carlo Barbieri, je sais que nous nous reverrons bientôt.

Pour la fin de mes études, je veux remercier tous les professeurs que j'ai connu depuis tout petit. J'ai une grande pensée pour Jean-Luc Lebarbanchon qui m'a fait découvrir l'informatique et qui a toujours voulu m'apprendre plein de choses. Merci à Messieurs Protin, Laversin et Lorrain d'aimer et de m'avoir fait aimer les sciences ! Je tiens également à remercier mes directeurs de stage de Master 1 Ashton Bradley et Matthew Davis de m'avoir offert cette fabuleuse opportunité.

Grand grand merci à Professeur Nino, Chuba et Phiphou pour tous ce qu'on a pu faire à Bruxelles et ailleurs. Merci au Sud...Brice, Naëlle et Mouts ainsi qu'à nos amis Gadz Niluj et Smax.

Pour finir merci à ma famille. Un grand merci à mes beau-parents Edwige et Pascal et aux tontons flingueurs de m'avoir si bien accueilli chez vous. Merci à mes grands-parents Kika et Roger ainsi qu'à mes parents Geneviève et Gérard d'avoir toujours été là pour moi et d'avoir toujours cru en moi. Et bien évidemment je remercie les deux personnes qui partagent mon quotidien Ghinzu et Marion. Merci de me supporter, de m'avoir soutenu et je sais que vous serais toujours là pour moi.

Table des matières

Remerciements v

Table des matières vii

Introduction 1

I. Collisions de quelques fermions en onde s 5

1. Collisions à basse énergie 7

1.1. Rappels de théorie de la diffusion quantique 7
1.1.1. États liés et de diffusion 7
1.1.2. États propres de l'équation de Schrödinger 8
1.1.3. Propriétés asymptotiques de la fonction d'onde 9
1.1.4. Matrice T 9
1.1.5. Simplifications à basse énergie 10
1.2. Les gaz de fermions dilués à basse température 12
1.2.1. Principe de Pauli 12
1.2.2. Potentiels d'interaction 12
1.2.3. État lié 13
1.2.4. Gaz de fermions à température nulle 14
1.3. Techniques diagrammatiques 14
1.3.1. Fonctions de Green 14
1.3.2. Développement perturbatif de la fonction de Green 16
1.3.3. Calcul des diagrammes de Feynman 18
1.3.4. Self-énergie et équation de Dyson 19
1.4. Problème à deux corps 21
1.4.1. Équation de Schrödinger avec pseudo-potentiel 21
1.4.2. Vertex de diffusion fermion-fermion 21
Conclusion 25

2. Amplitude de diffusion dimère-fermion **27**
2.1. Équation intégrale exacte pour l'amplitude de diffusion 27
2.1.1. Description diagrammatique du vertex dimère-fermion 27
2.1.2. Amplitude de diffusion élastique en onde s 29
2.2. Calcul de la longueur de diffusion 31
2.2.1. Résultat analytique pour un fermion de masse infinie 31
2.2.2. Développements pour un fermion léger 32
2.2.3. Lien avec l'équation de Schrödinger 34
2.2.4. Conditions aux limites 34
2.2.5. Solution approchée 35
2.2.6. Développements analytiques et résultats numériques 38
2.3. Calcul de l'amplitude de diffusion 41
2.3.1. Équation à énergie finie pour un fermion léger 42
2.3.2. Fonction d'onde et déphasage 43
2.3.3. Solution approchée de l'équation de Schrödinger 43
2.3.4. Résultats analytiques et numériques 44
2.3.5. Quantités physiques pour la diffusion dimère-fermion à basse énergie 45

3. Longueur de diffusion dimère-dimère en onde s **51**
3.1. Vertex de diffusion dimère-dimère 51
3.1.1. Description exacte 51
3.1.2. Calcul de la longueur de diffusion 55
3.1.3. Règle de somme 56
3.2. Longueur de diffusion élastique en onde s 57
3.2.1. Simplification à grand rapport des masses 57
3.2.2. Résolution des équations dans la limite de masse lourde 60
3.2.3. Discussion des résultats 62

Conclusion et perspectives **69**

II. Thermodynamique d'un gaz de fermions ultra-froid 71

4. Description théorique de la transition BEC-BCS **73**
4.1. Traitement de la phase condensée 73
4.1.1. Hamiltonien dans la phase superfluide 73
4.1.2. Développement perturbatif de la fonction de Green non diagonale 75
4.1.3. Équation de Dyson dans la phase superfluide 79
4.2. Traitement en champ moyen 81
4.2.1. Théorie BCS à température nulle 81
4.2.2. Transition BEC-BCS à la BCS 83
4.3. Développements d'ordre supérieur 85
4.3.1. Théorie NSR 85
4.3.2. Approximation de la matrice T 88
4.3.3. Extension à la phase superfluide 89

4.4. Instabilité du gaz de fermions . . . 90
4.4.1. État normal . . . 91
4.4.2. État superfluide . . . 92
4.4.3. Régularisation dans le cas du gaz de Bose . . . 94

5. Énergie d'un gaz de fermions en interaction de contact 97
5.1. Problème à deux corps . . . 97
5.1.1. Divergence de l'énergie cinétique . . . 97
5.1.2. Régularisation de la limite de contact . . . 98
5.2. Problème à N corps . . . 101
5.2.1. Formule de Tan . . . 101
5.2.2. Dérivation . . . 101
5.2.3. Généralisations . . . 105
5.3. Approche en théorie des champs . . . 107
5.3.1. Décroissance algébrique de la distribution en impulsion . . . 107
5.3.2. Self-énergie dans la phase normale . . . 108
5.3.3. Énergie d'un gaz en interaction de contact . . . 109
5.3.4. Phase superfluide . . . 110
5.4. Résultats numériques . . . 112
5.4.1. Unitarité et relation d'échelle . . . 112
5.4.2. Autres formules pour le calcul de l'énergie . . . 112

6. Équation d'état dans la limite BEC 117
6.1. Limite BEC à température nulle . . . 117
6.2. Théorie BCS . . . 118
6.2.1. Équation d'état dans la limite BEC . . . 119
6.3. Formalisme général du développement . . . 120
6.3.1. Réécriture des équations de Dyson superfluides . . . 120
6.3.2. Développement des fonctions de Green normales . . . 122
6.3.3. Développement des fonctions de Green anormales . . . 123
6.4. Développements diagrammatiques . . . 124
6.4.1. Ordre le plus bas . . . 124
6.4.2. Ordre en densité . . . 126
6.4.3. Équation du gap . . . 128
6.5. Résultats analytiques . . . 130
6.5.1. Densité de l'espèce $\uparrow$ . . . 130
6.5.2. Densité de l'espèce $\downarrow$ . . . 135
6.5.3. Potentiel chimique μ_B . . . 136
6.5.4. Équation d'état . . . 137
6.5.5. Impureté et gap à une particule . . . 138

Conclusion et perspectives 141

A. Développements analytiques 143
A.1. Décomposition en harmoniques sphériques . . . 143

A.2. Équations intégrales couplées pour les parties réelles et imaginaires de l'amplitude de diffusion dimère-fermion en onde s 145
A.3. Équations intégrales couplées des vertex T_4 et ϕ en onde s et à énergie nulle 146
A.3.1. Équation du vertex t_4 146
A.3.2. Équation du vertex ϕ 147
A.4. Sommation sur les fréquences de Matsubara à température nulle 148

Bibliographie **151**

Publications **155**

Résumé **194**

Introduction

En mécanique quantique, nous pouvons différencier les particules en deux catégories. Celles qui ont un spin entier sont appelées *bosons* ; leur fonction d'onde doit être symétrique par échange de deux particules. Les particules de spin demi-entier sont appelées *fermions* et ont une fonction d'onde antisymétrique. Un système quantique composé de N particules a des propriétés microscopiques et macroscopiques différentes selon le type des particules. L'influence de la mécanique quantique apparaît lorsque la longueur d'onde de De Broglie $\lambda = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ est de l'ordre de la distance entre les particules [CT98] (m est la masse des particules, h la constante de Planck, k_B la constante de Boltzmann et T la température du système).

Pour des bosons, l'abaissement de la température conduit à une transition de phase vers un état superfluide, appelée la Condensation de Bose-Einstein (BEC pour Bose-Einstein Condensation) [CT97]. A basse température, les particules s'accumulent dans le niveau de plus basse énergie pour former un *condensat de Bose-Einstein*. A température nulle, toutes les particules sont dans l'état fondamental. Cette condensation a été observée expérimentalement pour la première fois par Cornell et Wieman (JILA) et par Ketterle (MIT) en 1995 [AEM$^+$95, DMA$^+$95].

En revanche, pour un gaz de fermions, le principe d'exclusion de Pauli interdit à deux particules identiques de se trouver dans le même état quantique. A température nulle, les fermions indépendants (c'est à dire sans interaction) occupent alors les niveaux d'énergie les plus bas avec un seul fermion par niveau d'énergie. Ceux-ci forment la mer de Fermi. Le niveau de plus haute énergie occupé détermine l'énergie de Fermi $E_F = \hbar^2 k_F^2/(2m)$ où k_F est appelé le vecteur d'onde de Fermi et est relié à la densité de particules $n = k_F^3/(6\pi^2)$. Le régime de dégénérescence quantique est alors obtenu lorsque la température T est de l'ordre de la température de Fermi $T_F = E_F/k_B$ mais aucune transition de phase n'existe.

La présence d'une interaction attractive entre fermions change la donne. Par exemple, dans les supraconducteurs, l'interaction attractive médiée par les phonons entraîne à basse température l'apparition d'un état superfluide fermionique. C'est le phénomène de supraconductivité. Ce type de superfluide fermionique existe aussi en physique nucléaire pour les étoiles à neutrons ainsi que pour la matière de quarks [Sa 08].

L'étude des systèmes fermioniques s'est beaucoup développée ces dernières années autour des gaz de fermions ultra-froids. Dans ces systèmes, l'interaction effective entre les

fermions est très simple et complètement caractérisée par un unique paramètre, la longueur de diffusion entre fermions en onde-s, notée a. Le grand intérêt de ces systèmes est que l'on peut faire varier l'interaction effective entre les particules. En effet, la résonance de Feschbach permet de changer la longueur de diffusion en appliquant un champ magnétique. Il est à noter qu'à cause du principe de Pauli, l'interaction entre particules indiscernables disparaît à basse température. Les gaz réalisés expérimentalement sont alors composés d'atomes discernables que nous appelons $\uparrow$ et $\downarrow$ dans cette thèse. En pratique, ce sont, par exemple, deux sous-niveaux Zeeman d'un atome de Lithium 6 [KZ08]. On observe alors suivant la force de l'interaction différents régimes dans ces gaz.

Tout d'abord, il est possible d'observer un superfluide fermionique analogue au phénomène de la supraconductivité dans les métaux. C'est un phénomène collectif décrit par la théorie de Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) [BCS57]. Ces auteurs ont montré qu'une interaction attractive en présence d'une mer de Fermi provoque l'appariement des particules en paires de Cooper. Ce sont des "molécules" de grandes tailles constituées de deux particules d'impulsions opposées. L'énergie de liaison, notée 2Δ, dépend alors de la densité de particules. La température de transition superfluide est de l'ordre de Δ/k_B.

Si l'interaction est caractérisée par un puits de potentiel suffisamment profond, il peut y avoir apparition d'un état lié entre deux fermions. L'énergie de cet état lié vaut $E_b = -\hbar^2/(2ma^2)$ et dépend de la force de l'interaction. Contrairement à une paire de Cooper, ce n'est pas un phénomène collectif et c'est un appariement dans l'espace des positions. La molécule formée de deux fermions est un boson composite dont la taille est de l'ordre de la longueur de diffusion. Il existe alors une température critique de condensation telle que les dimères peuvent subir une condensation de Bose-Einstein. Les deux régimes décris ici sont deux superfluides de types bien différents.

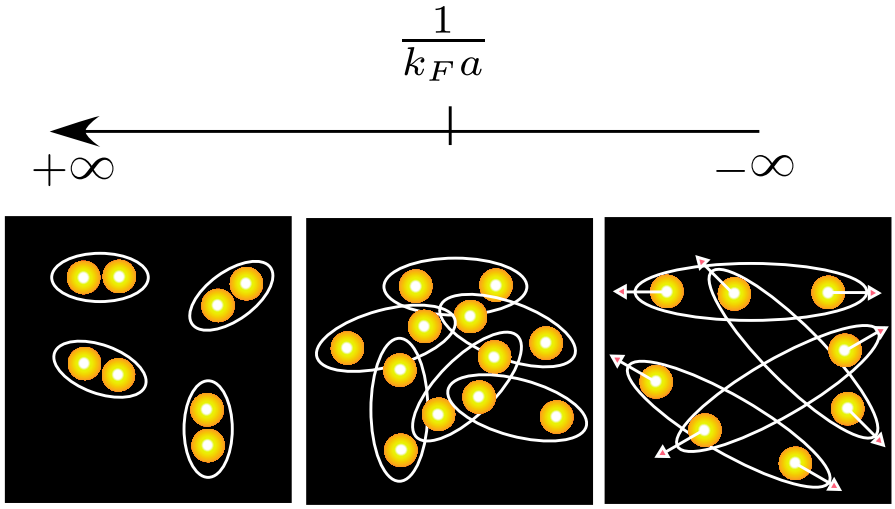


FIGURE 0.1.: Schéma de la transition BEC-BCS. La limite BEC est caractérisée par $1/(k_F a) \to +\infty$ alors que la limite BCS est lorsque $1/(k_F a) \to -\infty$.

Pour les atomes ultra froids, on peut faire varier de façon continue la longueur de diffusion, donc l'interaction effective. Il existe alors une transition continue entre ces deux régimes superfluides appelée la transition BEC-BCS. Pour fixer les idées, nous représentons sur la figure (0.1) le schéma usuel de la transition BEC-BCS en fonction du paramètre de la transition $1/(k_F a)$ (il n'y a qu'un seul paramètre sans dimension construit à partir de a et de k_F). La limite BEC est caractérisée par $1/(k_F a)$ tendant vers l'infini par valeur positive. On a affaire à un gaz de bosons composites de petite taille devant la distance entre particules. L'énergie de l'état liée est alors très grande et négative. A l'opposé, lorsque $1/(k_F a)$ tend vers l'infini par valeur négative, l'état lié n'existe pas mais un appariement en paires de Cooper est possible à basse température. Entre ces deux régimes une transition continue s'effectue via la limite où la longueur de diffusion diverge. C'est la *limite unitaire* également appelée *unitarité*. L'interaction effective entre particules est alors très importante et cela rend la description du système beaucoup plus compliquée (ce n'est plus un système dilué pour lequel $|na^3| \ll 1$). Le système est alors fortement corrélé et la compréhension de tels phénomènes est un enjeu majeur de la physique contemporaine (voir supraconducteurs à haute température critique [GPS08]).

L'équation d'état qui détermine toutes les propriétés physiques du système a été récemment mesurée pour un système composé d'un mélange de Lithium 6 dans deux états hyperfins différents [NNJ$^+$10]. En notant les états $\uparrow$ et $\downarrow$ cela revient à considérer un système où $m_\uparrow = m_\downarrow$. L'activité expérimentale se développe également pour des mélanges d'atomes de différentes masses où de nouveaux phénomènes peuvent exister (phase cristalline), notamment, quand le rapport des masses entre les deux espèces devient grand [PAP$^+$07]. On peut également polariser le système en mélangeant des espèces présentes en quantités différentes. Ces systèmes de fermions froids ont beaucoup d'intérêt car ils permettent de réaliser différents systèmes fortement corrélés tout en ayant une interaction effective simple entre particules et à courte portée (systèmes "modèles").

Dans la première partie de cette thèse, nous nous intéressons à un gaz de fermions froids dont le rapport des masses est grand. Dans la limite BEC, il existe un état lié de grande énergie de liaison, et à très basse température, ces molécules bosoniques peuvent subir une condensation de Bose-Einstein. Si de plus le gaz est polarisé, il reste un excès de fermions non condensés, les propriétés de ce gaz à basse énergie sont donc déterminées par l'amplitude de diffusion dimère-dimère et l'amplitude de diffusion dimère-fermion. Ces deux quantités sont induites par la nature fermionique des particules formant l'état lié (dimère).

Dans le premier chapitre, nous rappelons le principe de la diffusion quantique à basse énergie, notamment la collision en onde-s. Puis, nous présentons les méthodes utilisées en théorie des champs dans la phase normale et les appliquons à la résolution du problème à deux corps en interaction de contact, dans le vide. Dans le second chapitre, nous présentons un développement analytique de l'amplitude de diffusion dimère-fermion en onde-s à grand rapport des masses et dans le troisième chapitre, nous obtenons la longueur de diffusion dimère-dimère en onde-s dans cette même limite. Tous les résultats sont obtenus en développant les équations diagrammatiques exactes des problèmes à 3 et 4 corps.

La seconde partie de cette thèse est consacrée aux propriétés thermodynamiques du problème à N corps. Dans le quatrième chapitre, nous présentons l'extension à la phase superfluide des théories diagrammatiques. Puis, nous présentons la théorie BCS, celle de Nozières et Schmitt-Rink (NSR) [NSR85] ainsi que l'approximation de la matrice T dans les phases normales et superfluides [PPS04], que nous avons exploitées. Ces théories ont le mérite d'être simples et de bien décrire qualitativement (et même quantitativement dans certaines limites) la transition BEC-BCS. Toutefois, nous montrons qu'elles posent un problème : le gaz est instable lors de la transition superfluide, ce qui n'a jamais été observé expérimentalement.

Le cinquième chapitre est une étude analytique du comportement à grande impulsion de la distribution de particules. Pour une interaction de contact, il est bien connu que la distribution décroit algébriquement comme $1/k^4$ et provoque une divergence de l'énergie cinétique à 2 et 3 dimensions. Shina Tan a proposé une formule générale [Tan08] régularisant ce problème. Nous proposons une nouvelle démonstration de cette formule intimement liée au problème à 2 corps. Nous obtenons par les méthodes diagrammatiques une expression similaire et nous calculons numériquement l'équation d'état à l'unitarité dans l'approximation de la matrice T, afin de la comparer aux récents résultats expérimentaux.

Dans le dernier chapitre, nous calculons par une théorie purement fermionique, un développement exact de l'équation d'état dans la limite BEC en puissance de la densité du gaz. Ce calcul est effectué pour des espèces de masses différentes et en déséquilibre de population. Le principe d'un tel développement a déjà été effectué pour des masses égales et sans déséquilibre de population et a été confirmé expérimentalement.

Première partie .

Collisions de quelques fermions en onde s

Chapitre 1

Collisions à basse énergie

Dans ce chapitre, nous commençons par effectuer des rappels de la théorie de la diffusion quantique, notamment que le comportement de la fonction d'onde à grande distance devant le centre de diffusion est caractérisé par l'amplitude de diffusion. A basse énergie, un développement en onde partielle de celle-ci montre que la collision entre fermions est isotrope et est bien caractérisée par une longueur, la longueur de diffusion en onde s.

Puis, nous présentons brièvement les gaz de fermions à basse température afin de modéliser l'interaction entre les particules fermioniques dans différents états hyperfins. Nous présentons le gaz de fermions déséquilibré à température nulle et les quantités caractérisant les collisions dans ce gaz.

Nous exposons ensuite les techniques diagrammatiques, utilisées dans cette thèse pour calculer les propriétés de collision et les propriétés thermodynamiques des gaz ultra froids. Nous présentons les fonctions de Green ainsi que les diagrammes de Feynman.

Pour finir, ces outils sont appliqués à la résolution du problème à deux corps dans la limite où la portée du potentiel d'interaction est très petite devant la longueur d'onde de De Broglie.

1.1. Rappels de théorie de la diffusion quantique

Dans cette section, nous rappelons les principes de la diffusion quantique qui sont plus détaillés dans [CT98, BD02, Asl08].

1.1.1. États liés et de diffusion

Afin d'étudier le mouvement quantique des particules, la première étape consiste à déterminer les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger. L'opérateur d'évolution permet alors d'obtenir leur évolution dans le temps. Les états stationnaires sont donnés par :

$$H\psi\left(\mathbf{r}\right) = E\psi\left(\mathbf{r}\right) \tag{1.1}$$

où H est l'hamiltonien du système et ψ la fonction d'onde d'énergie E. Comme en mécanique classique, on distingue deux états. Les états liés dont la fonction d'onde en module au carré est normalisée. Cela signifie qu'il est certain de trouver la particule dans un espace confiné. Leur énergie doit être inférieure à la valeur du potentiel à l'infini V_∞.

L'équation de Schrödinger (1.1) possède d'autres solutions, les états de diffusion. Ceux-ci ne sont pas décris par des fonctions de carré sommable et leur énergie est supérieure à V_∞. On montre qu'ils forment un ensemble continu d'état, décrit asymptotiquement par des ondes planes. Nous allons maintenant donner une expression de ces états de diffusion dans le cas de la collision de deux particules.

1.1.2. États propres de l'équation de Schrödinger

En toute généralité, en se plaçant dans le référentiel du centre de masse, nous pouvons décrire la collision de deux particules comme le mouvement d'un seul corps dans un potentiel fictif $V(\mathbf{r})$. La position relative des particules est donnée par le vecteur $\mathbf{r}$. Pour calculer les états de diffusion, nous devons choisir une énergie positive $E = \hbar^2\mathbf{k}_E^2/(2m_{\uparrow,\downarrow})$. La masse réduite du système i-j est notée dans la suite $m_{i,j}$. L'hamiltonien dans le référentiel du centre de masse est alors :

$$H = -\frac{\hbar^2\Delta_{\mathbf{r}}}{2m_{\uparrow,\downarrow}} + V(\mathbf{r}) \tag{1.2}$$

L'équation de Schrödinger (1.1) devient :

$$\left(\Delta_{\mathbf{r}} + \mathbf{k}_E^2\right)\psi_E(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\,\psi_E(\mathbf{r}) \tag{1.3}$$

où nous avons posé $U(\mathbf{r}) = 2m_{\uparrow,\downarrow}/\hbar^2 V(\mathbf{r})$. Pour des particules libres ($V = 0$), les solutions sont des ondes planes d'énergie E. Nous pouvons alors écrire la solution générale de (1.3) sous la forme d'une intégrale :

$$\psi_E(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_E\mathbf{r}} + \int d^3r' G_E(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,U(\mathbf{r}')\,\psi_E(\mathbf{r}') \tag{1.4}$$

$$\text{avec } G_E(\mathbf{r}) = \frac{-e^{ik_E r}}{4\pi r} \tag{1.5}$$

où G_E est la fonction de Green à 3 dimensions associée au membre de gauche de l'équation (1.3). Cette équation (1.4) est appelée équation intégrale de la diffusion. Le premier terme décrit une onde plane incidente d'énergie E alors que le second terme représente l'onde diffusée après l'interaction. Cette dernière dépend de l'énergie de la particule incidente. Nous allons définir l'amplitude de diffusion en analysant le comportement asymptotique de la fonction d'onde (1.4).

1.1.3. Propriétés asymptotiques de la fonction d'onde

La fonction d'onde (1.4) se comporte à grande distance devant le centre de diffusion comme la somme d'une onde plane incidente et d'une onde sphérique diffusée qui dépend des caractéristiques de la diffusion. On écrit le comportement asymptotique de la fonction d'onde :

$$\psi_E(\mathbf{r}) \sim_{r\to\infty} e^{i\mathbf{k_E r}} + f(k_E; \mathbf{u}, \mathbf{u}') \frac{e^{ik_E r}}{r} \tag{1.6}$$

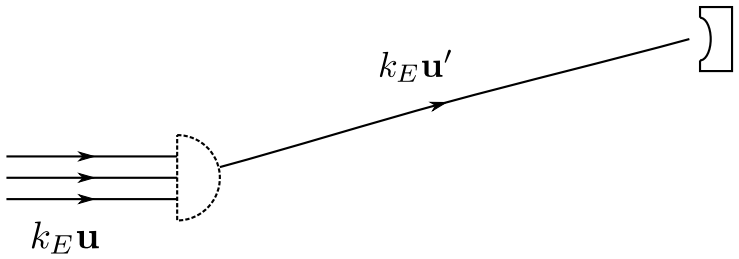


FIGURE 1.1.: Schéma d'une expérience de diffusion. A gauche est représentée l'onde plane incidente alors que l'onde sphérique diffusée est représentée à droite.

Cette relation définit l'amplitude de diffusion $f(k_E; \mathbf{u}, \mathbf{u}')$, où $\mathbf{u}$ est la direction de la particule incidente et $\mathbf{u}'$ celle de la particule diffusée. Son module au carré est égal à la section efficace différentielle par rapport à l'angle solide. Le schéma d'une expérience de diffusion est représenté sur la figure (1.1). En plaçant un détecteur loin du centre de diffusion, on peut alors mesurer expérimentalement cette quantité. En développant la fonction de Green (1.5) à grande distance devant le centre de diffusion, on peut identifier l'amplitude de diffusion qui s'écrit :

$$f(k_E; \mathbf{u}, \mathbf{u}') = \frac{-1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r} e^{-ik_E \mathbf{u}'\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \psi_E(\mathbf{r}) \tag{1.7}$$

Le calcul de la transformée de Fourier de l'équation (1.4) permet d'établir un lien entre l'amplitude de diffusion (1.7) et la fonction d'onde :

$$\psi_E(\mathbf{k}) = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_E) - \frac{4\pi f(k_E; \mathbf{u}, \mathbf{u}')}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_E^2 - i0^+} \tag{1.8}$$

Nous allons maintenant présenter les simplifications intervenant à basse énergie, et notamment en déduire que la diffusion se produit principalement en onde s. C'est à dire qu'elle est isotrope et caractérisée par une seule longueur.

1.1.4. Matrice T

Nous introduisons maintenant l'opérateur matrice T, définit comme :

$$T\left|\mathbf{k}_E\right\rangle = V\left|\psi_E\right\rangle \tag{1.9}$$

En utilisant l'équation intégrale de la diffusion (1.4) en transformée de Fourier $|\psi_E\rangle = |\mathbf{k}_E\rangle + GV|\psi_E\rangle$ et en l'écrivant pour l'opérateur T (1.9), on obtient l'équation récursive :

$$T\left|\mathbf{k}_E\right\rangle = V\left|\mathbf{k}_E\right\rangle + VGT\left|\mathbf{k}_E\right\rangle \tag{1.10}$$

où G est la fonction de Green associée à l'équation de Schrödinger sans interaction. Nous l'avons déjà utilisée pour établir l'équation intégrale de la diffusion (1.4). On montre alors que par la connaissance de cet opérateur T, on a accès à l'amplitude de diffusion par la relation :

$$f\left(k_E;\mathbf{u},\mathbf{u}'\right) = -\frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{2\pi}\left\langle \mathbf{k}'_E\left|T\right|\mathbf{k}_E\right\rangle \tag{1.11}$$

1.1.5. Simplifications à basse énergie

A très basse température, l'énergie cinétique des atomes est très faible et il est possible d'atteindre un régime où $k_E r_0 \ll 1$, où la portée du potentiel est notée r_0. Pour des distances plus grande que cette portée, on considère que le potentiel est essentiellement nul. Dans l'expression (1.7), l'intégrande vaut donc zéro excepté lorsque $r < r_0$. On peut alors remplacer l'exponentielle par un, et l'amplitude de diffusion se réduit à :

$$f\left(k_E;\mathbf{u},\mathbf{u}'\right) \sim_{k_E r_0 \ll 1} \frac{-1}{4\pi}\int d^3\mathbf{r} U\left(\mathbf{r}\right)\psi_E\left(\mathbf{r}\right) \tag{1.12}$$

On constate alors dans l'expression (1.12), que l'amplitude de diffusion est isotrope et dépend seulement de la norme de l'impulsion $\mathbf{k_E}$.

Développement en ondes partielles

Si le potentiel U est isotrope, on peut réécrire la fonction d'onde comme :

$$\psi_E\left(\mathbf{r}\right) = \frac{u_{k_E,l}\left(r\right)}{r}Y_l^m\left(\theta,\phi\right) \tag{1.13}$$

où $u_{k_E,l}$ est appelée la fonction d'onde réduite. Les Y_l^m sont les harmoniques sphériques. l et m sont des indices entiers telles que $-l \leq m \leq l$. L'équation de Schrödinger (1.3) devient alors pour la fonction d'onde réduite :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_E^2 - \frac{l\left(l+1\right)}{r^2} - U\left(r\right)\right]u_{k_E,l}\left(r\right) = 0 \tag{1.14}$$

où le potentiel est modifié par le troisième terme entre crochets qui représente une barrière de potentiel centrifuge. On montre que la fonction d'onde doit respecter la condition $u_{k_E,l=0}(0) = 0$.

Déphasages

Les solutions de l'équation de Schrödinger radiale (1.14) quand le potentiel U est nul, sont les fonctions de Bessel de première espèce $\sqrt{r}J_{(2l+1)/2}(k_E r)$. A grande distance, on écrit le développement asymptotique de cette fonction comme la superposition d'une onde incidente et d'une onde réfléchie à une dimension :

$$u^{(0)}_{k_E,l}(r) \sim_{r\to\infty} e^{i(k_E r - l\pi/2)} - e^{-i(k_E r - l\pi/2)} \tag{1.15}$$

Lorsque le potentiel est différent de zéro, le coefficient de réflexion est en module égal à un. L'onde réfléchie a donc simplement un facteur de phase par rapport à (1.15). On peut montrer que l'équation (1.14) a une solution qui a le comportement asymptotique :

$$u_{k_E,l}(r) \sim_{r\to\infty} \sin\left[k_E r - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k_E)\right] \tag{1.16}$$

où les coefficients $\delta_l(k_E)$ sont appelés déphasages en onde l. Le lien entre l'amplitude de diffusion et les déphasages est donné par :

$$f(k_E; \mathbf{u}, \mathbf{u}') = \frac{1}{k_E}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}e^{i\delta_l(k_E)}\sin[\delta_l(k_E)]\,Y_l^0(\theta) \tag{1.17}$$

où θ est l'angle entre les vecteurs impulsion incidente et impulsion diffusée.

Longueur de diffusion

Si nous considérons que le potentiel a une très petite portée telle que $k_E r_0 \ll 1$, nous pouvons dans un premier temps, prendre en compte seulement le potentiel effectif centrifuge. En comparant celui-ci à l'énergie cinétique de la particule, nous définissons une portée caractéristique pour le potentiel effectif $R_l \sim \sqrt{l(l+1)}/k_E$. Une particule d'énergie k_E ne peut s'approcher de l'origine à une distance inférieure à R_l. Il est alors immédiat de voir, que pour les ondes $l \geq 1$, on a $k_E R_l \geq 1$. On en déduit que $R_l \gg r_0$. Cela implique que les ondes $l \geq 1$ sont peu sensibles au potentiel de portée r_0. On considère donc seulement la diffusion en onde s (c'est à dire $l = 0$). L'amplitude de diffusion ne dépend plus que de la norme du vecteur d'onde $\mathbf{k}_E$ et vaut :

$$f_s(k_E) = \frac{e^{i\delta_0(k_E)}\sin[\delta_0(k_E)]}{k_E} \tag{1.18}$$

La longueur de diffusion en onde s est définie comme :

$$a_s = -\lim_{k_E \to 0} f_s(k_E) \tag{1.19}$$

et la section efficace vaut $\sigma_s = 4\pi a_s^2$. On voit que dans ces régimes de très basse température, les collisions sont isotropes et déterminées par un seul et unique paramètre, la longueur de diffusion en onde s.

Portée effective

Une autre grandeur d'intérêt dans ces gaz est la portée effective r_e. Elle est obtenue en développant, à l'ordre 2 en puissance de l'impulsion, l'inverse de l'amplitude de diffusion :

$$f_s(k_E) \sim_{k_E \to 0} -\left[\frac{1}{a_s} + ik_E - \frac{1}{2} r_e k_E^2\right]^{-1} \tag{1.20}$$

Le terme linéaire en k_E est le théorème optique et est obtenu trivialement dans l'expression (1.18). Nous allons maintenant discuter des propriétés de collision dans les gaz de fermions à basse température réalisés expérimentalement, puis nous présentons le système physique d'intérêt dans cette première partie.

1.2. Les gaz de fermions dilués à basse température

1.2.1. Principe de Pauli

Pour des fermions, une conséquence du principe de Pauli est que la fonction d'onde doit être antisymétrique par échange de deux particules fermioniques indiscernables. Dans le référentiel du centre de masse, cela signifie que la fonction d'onde change de signe en changeant le vecteur position en son opposé. En antisymétrisant la fonction d'onde (1.6) on trouve :

$$\psi_E(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_E \mathbf{r}} - e^{-i\mathbf{k}_E \mathbf{r}} + \left[f(k_E; \mathbf{u}, \mathbf{u}') - f(k_E; -\mathbf{u}, -\mathbf{u}')\right] \frac{e^{ik_E r}}{r} \tag{1.21}$$

Or nous avons vu qu'à basse température, l'amplitude de diffusion (1.18) est isotrope. On en déduit que le coefficient devant l'onde sphérique diffusée dans l'équation (1.21) vaut zéro. Il n'y a pas de diffusion en onde s. Un gaz de fermions dans un seul état interne et à très basse température se comporte donc comme un gaz parfait. Il est donc d'intérêt de mélanger des fermions dans deux états hyperfins différents que nous notons $\uparrow$ et $\downarrow$. La collision entre un fermion $\uparrow$ et un fermion $\downarrow$ est alors caractérisée par la longueur de diffusion en onde s notée $a_{\uparrow,\downarrow}$.

1.2.2. Potentiels d'interaction

Expérimentalement, les gaz produits sont dilués et la portée du potentiel interatomique est très petite devant la distance entre les particules. De plus, à très basse température,

nous avons vu que les détails du potentiel à courte distance n'ont pas d'influence. Seule la longueur de diffusion est importante et détermine les caractéristiques de la collision. Nous pouvons ainsi utiliser des potentiels simplifiés qui décrivent la bonne longueur de diffusion. Dans les calculs diagrammatiques, nous utilisons une interaction de contact :

$$V_c(\mathbf{r}) = g_{\uparrow,\downarrow}\delta^{(3)}(\mathbf{r}) \tag{1.22}$$

où la constante de couplage entre deux fermions de différente espèce est :

$$g_{\uparrow,\downarrow} = 2\pi a_{\uparrow,\downarrow}/m_{\uparrow,\downarrow} \tag{1.23}$$

L'inconvénient de ce type de potentiel est que le terme d'énergie cinétique présente une divergence à courte distance (voir section 5.1.1). Nous présentons à la section (1.4.2) comment le régulariser, dans les techniques diagrammatiques, en introduisant une coupure à grande impulsion. Une autre méthode pour s'affranchir de ce problème est d'utiliser le pseudo-potentiel défini comme :

$$V_p(\mathbf{r}) = g_{\uparrow,\downarrow}\delta^{(3)}(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial r}r \tag{1.24}$$

Ce potentiel permet de traiter correctement une équation de Schrödinger, aussi bien dans le problème à deux, trois ou quatre corps. Définit suivant (1.24), il décrit la même longueur de diffusion que (1.22). La fonction d'onde a courte distance doit également respecter la condition de Bethe-Peierls donnée par :

$$\psi_E(\mathbf{r}) \sim_{r\to 0} \frac{1}{r} - \frac{1}{a_{\uparrow,\downarrow}} \tag{1.25}$$

1.2.3. État lié

Dans les expériences d'atomes froids, il est possible de faire varier la longueur de diffusion par une résonance de Feschbach. Cette longueur de diffusion peut être positive ou négative et lorsque $a_{\uparrow,\downarrow} > 0$, il peut apparaître un état lié formé de deux fermions $\uparrow$ et $\downarrow$. On peut montrer que lorsque la portée du potentiel est bien plus petite que la longueur de diffusion en onde s, l'énergie du dimère composite ne dépend pas des détails du potentiel à courte distance et son énergie vaut $E_b = -\hbar^2/(2m_{\uparrow,\downarrow}a_{\uparrow,\downarrow}^2)$. La fonction d'onde de l'état lié est alors :

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/a_{\uparrow,\downarrow}}}{\sqrt{2\pi a_{\uparrow,\downarrow}}r} \tag{1.26}$$

Cette prédiction a été observé expérimentalement [RTBJ03].

1.2.4. Gaz de fermions à température nulle

Nous considérons dans cette première partie un gaz de fermion composé de $N_\uparrow$ particules de l'espèce $\uparrow$ en interactions avec $N_\downarrow$ particules de l'espèce $\downarrow$. L'espèce $\uparrow$ est majoritaire, c'est à dire $N_\uparrow > N_\downarrow$. A température nulle, l'interaction en onde s se produit entre particules de différentes espèces. Comme le gaz est dilué, la collision est principalement, une interaction à deux corps, bien décrite par un potentiel à courte portée.

Dans la limite BEC ($a_{\uparrow,\downarrow} \to 0^+$), l'état lié à deux corps existe, d'énergie tendant vers $-\infty$, et la distance entre les particules est bien plus grande que la taille d'un dimère (de l'ordre de $a_{\uparrow,\downarrow}$). A température nulle, le gaz sera donc formé de $N_\downarrow$ état liés en interactions avec une mer de Fermi de $N_\uparrow - N_\downarrow$ particules $\uparrow$. On comprend alors que ce gaz sera caractérisé par deux longueurs de diffusion, celle entre deux dimères et celle entre un dimère et un fermion $\uparrow$.

Nous consacrons le chapitre 2 a une étude analytique de la longueur de diffusion dimère-fermion $\uparrow$ en onde s que nous notons $a_{d,\uparrow}$. Le chapitre 3 est une étude analytique de la longueur de diffusion dimère-dimère en onde s notée $a_{d,d}$. Notre étude est effectuée dans le cas général où les masses de ces deux types de fermions sont différentes et en utilisant la méthode diagrammatique. Cette méthode a tout d'abord été utilisée [PS00] pour calculer $a_{d,d}$ pour des masses des fermions $\uparrow$ et $\downarrow$ égales. Les auteurs de [PS00] ont obtenu un résultat approché donnant $0.75a_{\uparrow,\downarrow}$. Puis le résultat exact de $0.6a_{\uparrow,\downarrow}$ obtenu par [PSS04] en résolvant l'équation de Schrödinger a été confirmé en utilisant les méthodes diagrammatiques par [BKK$^+$06, LG06]. Nous allons maintenant présenter ces techniques et les appliquer au problème de la collision de deux fermions.

1.3. Techniques diagrammatiques

Dans cette section, nous expliquons le formalisme utilisé dans les méthodes diagrammatiques. Les différents éléments introduits sont détaillés dans [AGD65, FW71, Gir10]. Par la connaissance de la fonction de Green du système, on a accès à la valeur moyenne de tout opérateur à un corps. Cette fonction est déterminée en écrivant tous les diagrammes de Feynman représentant les interactions entre les particules.

1.3.1. Fonctions de Green

Pour notre système constitué de deux espèces fermioniques différentes ($\uparrow$ et $\downarrow$), l'hamiltonien dans l'ensemble grand canonique s'écrit :

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[\epsilon_\sigma(\mathbf{k}) - \mu_\sigma\right] c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} + H_{\text{int}} \tag{1.27}$$

où $\epsilon_\sigma(\mathbf{k}) = \hbar^2\mathbf{k}^2/(2m_\sigma)$ est l'énergie cinétique d'une particule σ d'impulsion $\mathbf{k}$ et μ_σ le potentiel chimique de l'espèce σ. L'opérateur $c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$ (respectivement $c_{\mathbf{k},\sigma}$) crée (respectivement détruit) une particule de l'espèce σ avec une impulsion $\mathbf{k}$. L'hamiltonien décrivant l'interaction est noté H_{int}. Les potentiels chimiques sont obtenus en respectant

les conditions :

$$\left\langle \Psi_0 \left| \sum_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} \right| \Psi_0 \right\rangle = N_\sigma \tag{1.28}$$

où $|\Psi_0\rangle$ est l'état fondamental du système à $N = N_\uparrow + N_\downarrow$ particules. En considérant un hamiltonien indépendant du temps et respectant l'invariance par translation, on montre que la fonction de Green à une particule et à température nulle est définie par :

$$G_\sigma(\mathbf{k}, t) = -i \left\langle \Psi_0 \left| T c_{\mathbf{k},\sigma}(t)\, c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}(0) \right| \Psi_0 \right\rangle \tag{1.29}$$

où $c_{\mathbf{k},\sigma}(t)$ est l'opérateur créant une particule σ d'impulsion $\mathbf{k}$ à l'instant t et l'opérateur T ordonne chronologiquement les opérateurs en temps décroissant de gauche à droite. Il est à noter, que pour des particules fermioniques la permutation de deux opérateurs (c et $c^{\dagger}$) entraîne un changement de signe. Pour des particules sans interaction $H_{\text{int}} = 0$, on peut calculer analytiquement la fonction de Green libre. On montre qu'elle vaut dans l'espace des impulsions :

$$G_{0,\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \left[\omega - \epsilon_\sigma(\mathbf{k}) + \mu_\sigma + i0^+ \text{sign}(k - k_{F,\sigma})\right]^{-1} \tag{1.30}$$

où la densité $N_\sigma/V = k^3_{F,\sigma}/(6\pi^2)$ détermine le vecteur d'onde de Fermi de l'espèce σ. V est le volume du système qui, à la limite thermodynamique, tend vers l'infini à densité de particule fixée. La fonction de Green (1.29) est également appelée propagateur car, pour $t > 0$ (respectivement $t < 0$) elle décrit la propagation d'une particule (respectivement d'un trou) avec une impulsion $\mathbf{k}$. Comme nous l'avons dit précédemment, en connaissant la fonction de Green du système, nous avons accès à la valeur moyenne d'un opérateur à un corps. On montre par exemple, que le nombre de particules s'obtient par la relation :

$$N_\sigma = \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} e^{i\omega 0^+} G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) \tag{1.31}$$

A température finie, il est possible de généraliser ces concepts en définissant la fonction de Green comme la moyenne statistique de $T c_{\mathbf{k},\sigma}(t)\, c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}(0)$. En pratique, il est plus commode d'utiliser le formalisme de Matsubara qui consiste à définir l'opérateur d'évolution en temps imaginaire $e^{\tau H}$. La fonction de Green à température finie est définie comme :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \tau) = -\frac{\text{Tr}\left[e^{-\beta H} T c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)\, c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}(0)\right]}{\text{Tr}\left[e^{-\beta H}\right]} \tag{1.32}$$

où $\text{Tr}[O]$ est la trace de l'opérateur O et $\beta = 1/T$ est la température inverse. L'évolution d'un opérateur au temps τ est donnée par :

$$c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) = e^{\tau H} c_{\mathbf{k},\sigma} e^{-\tau H} \tag{1.33}$$

Nous considérons ici aussi un hamiltonien indépendant du temps. On peut alors utiliser (1.33) et le fait que la trace soit invariante par permutation circulaire afin de montrer que la fonction de τ (1.32) est anti-périodique de période β. Dans l'espace des fréquences, elle s'écrit comme une série de Fourier avec des fréquences discrètes telles que $e^{i\omega_n \beta} = -1$ où n est un entier relatif. Ces fréquences ω_n sont appelées les fréquences de Matsubara :

$$\omega_n = \pi \frac{2n+1}{\beta},\ n \in \mathbb{Z} \tag{1.34}$$

On peut alors obtenir le propagateur libre à température finie en prenant $H_{\text{int}} = 0$:

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left[i\omega_n - \epsilon_\sigma(\mathbf{k}) + \mu_\sigma\right]^{-1} \tag{1.35}$$

Nous pouvons remarquer que cette fonction de Green à température finie est obtenue à partir de (1.30) en remplaçant la fréquence ω par $i\omega_n$. On peut également obtenir le nombre de particule en remplaçant l'intégration des fréquences sur l'axe réel dans (1.31) par une sommation sur les fréquences de Matsubara. On montre que :

$$N_\sigma = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n 0^+} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \tag{1.36}$$

Nous avons ici décrit notre outil de base, la fonction de Green. Nous allons maintenant expliquer comment calculer celle-ci en exprimant son développement perturbatif en puissances de l'hamiltonien d'interaction (H_{int}), comme une somme de diagrammes de Feynman.

1.3.2. Développement perturbatif de la fonction de Green

L'idée est d'effectuer un développement perturbatif en puissances de l'interaction. Connaissant les états propres de l'hamiltonien sans interaction ($H_{\text{int}} = 0$), nous travaillons en représentation d'interaction afin que les opérateurs c et $c^\dagger$ ne dépendent plus que de l'hamiltonien libre H_0. Les opérateurs en temps imaginaire sont alors définis comme $O(\tau) = e^{H_0 \tau} O e^{-H_0 \tau}$. On peut montrer que le propagateur (1.32) s'écrit :

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \tau) = -\frac{\left\langle T c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)\, c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}(0)\, U(\beta) \right\rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \tag{1.37}$$

où $\langle O(\tau) \rangle_0 = \text{Tr}\left[e^{-\beta H_0} O(\tau)\right] / \text{Tr}\left[e^{-\beta H_0}\right]$ est la moyenne statistique de l'opérateur $O(\tau)$ pour un système sans interaction. L'interaction apparaît alors seulement dans

l'opérateur $U(\beta)$ qui est égal à :

$$U(\beta) = T \exp\left[- \int_0^\beta d\tau_1 H_{\text{int}}(\tau_1) \right] \tag{1.38}$$

Nous effectuons alors un développement de l'opérateur (1.38) en puissance de l'interaction. A l'ordre zéro cet opérateur U vaut un et le propagateur (1.37), à cet ordre, est simplement le propagateur libre (1.35). Pour calculer les ordres suivants nous devons introduire l'hamiltonien d'interaction qui est de manière générale un produit des opérateurs de création et d'annihilation. Pour une interaction à deux corps entre les espèces $\uparrow$ et $\downarrow$, nous considérons que :

$$H_{\text{int}}(\tau) = \sum_{\mathbf{p_1},\mathbf{p_2},\mathbf{q}} V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{q})\, c^\dagger_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}\left(\tau^+\right) c^\dagger_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}\left(\tau^+\right) c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau)\, c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau) \tag{1.39}$$

où $V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{q})$ est la transformée de Fourier du potentiel d'interaction entre une particule $\uparrow$ et $\downarrow$. L'hamiltonien (1.39) décrit la destruction du fermion $\uparrow$ (respectivement $\downarrow$) au temps τ avec une impulsion $\mathbf{p_1}$ (respectivement $\mathbf{p_2}$). Après l'interaction $V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{q})$, il y a création d'une particule $\uparrow$ (respectivement $\downarrow$) au temps $\tau + 0^+$ avec une impulsion $\mathbf{p_1}+\mathbf{q}$ (respectivement $\mathbf{p_2}-\mathbf{q}$). Nous pouvons alors utiliser le développement de l'opérateur U (1.38) à l'ordre 1 afin de calculer la fonction de Green. Par exemple, le numérateur du propagateur (1.37) d'un fermion $\uparrow$ d'impulsion $\mathbf{k}$ est à cet ordre :

$$\sum_{\mathbf{p_1},\mathbf{p_2},\mathbf{q}} V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{q}) \int_0^\beta d\tau_1 \left\langle T c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)\, c^\dagger_{\mathbf{k},\uparrow} c^\dagger_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}(\tau_1)\, c^\dagger_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}(\tau_1)\, c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau_1)\, c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau_1) \right\rangle_0 \tag{1.40}$$

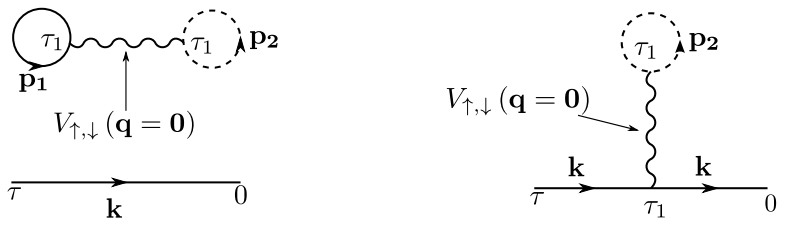
Nous utilisons alors le théorème de Wick qui dit que la moyenne statistique d'un produit de plusieurs opérateurs peut s'exprimer en fonction du produit des moyennes statistiques de ces opérateurs mis deux à deux. Il faut sommer le produit de tous les couples possibles. Dans la phase normale, on montre que les seuls couples d'opérateurs annihilation et création ne donnant pas une valeur moyenne nulle sont $\langle c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c^\dagger_{\mathbf{q},\sigma}(\tau')\rangle_0 = -\delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \mathcal{G}_{0,\sigma}(\mathbf{k}, \tau - \tau')$. Il faut que les opérateurs agissent sur la même espèce en créant et détruisant une particule ou un trou. Les vecteurs d'ondes des particules créées et détruites doivent être pris égaux, c'est un propagateur libre (particule ou trou) d'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{q}$. En utilisant le théorème de Wick et cette propriété, (1.40) a alors deux contractions possibles en appariant c_σ et $c^\dagger_\sigma$. La première possibilité est de calculer la moyenne statistique des deux premiers opérateurs de (1.40), c'est à dire ceux qui apparaissent explicitement dans la fonction de Green (1.37).

$$\left\langle c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)\, c^\dagger_{\mathbf{k},\uparrow} \right\rangle_0 \sum_{\mathbf{p_1},\mathbf{p_2},\mathbf{q}} V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{q}) \int_0^\beta d\tau_1 \underbrace{\left\langle c^\dagger_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}(\tau_1)\, c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau_1) \right\rangle_0}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \underbrace{\left\langle c^\dagger_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}(\tau_1)\, c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau_1) \right\rangle_0}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \tag{1.41}$$

La seconde possibilité est :

$$-\sum_{\mathbf{p_1},\mathbf{p_2},\mathbf{q}} V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{q}) \int_0^\beta d\tau_1 \underbrace{\left\langle c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)\, c^\dagger_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}(\tau_1)\right\rangle_0}_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q}=\mathbf{k}} \underbrace{\left\langle c^\dagger_{\mathbf{k},\uparrow} c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau_1)\right\rangle_0}_{\mathbf{p_1}=\mathbf{k}} \underbrace{\left\langle c^\dagger_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}(\tau_1)\, c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau_1)\right\rangle_0}_{\mathbf{q}=0} \tag{1.42}$$

Ces deux fonctions (1.41) et (1.42) peuvent être obtenues encore plus facilement. En effet, comme nous l'avons vu, il intervient un produit de trois propagateurs libres. Feynman a proposé de les décrire graphiquement. Nous dessinerons dans la suite la propagation libre d'un fermion ↑ par une ligne pleine et celle d'un ↓ par un ligne en tirets et correspondant respectivement aux fonctions de Green libres des fermions ↑ et ↓. La contribution (1.41) est représentée sur la figure (1.2a) alors que la contribution (1.42) est représentée sur la figure (1.2b). La ligne ondulée représente l'interaction $V_{\uparrow,\downarrow}$ qui est ici instantanée.



(a) Diagramme non connexe (1.41).

(b) Diagramme connexe (1.42).

FIGURE 1.2.: Diagrammes d'ordre 1 du numérateur de la fonction de Green (1.37).

Il y a deux catégories de diagrammes : les diagrammes connexes (1.2b) et les diagrammes non connexes (1.2a). On peut montrer que ces derniers sont exactement compensés par le dénominateur de la fonction de Green (1.37) $\langle U(\beta)\rangle_0$. On peut également montrer que les différentes façons de regrouper les opérateurs création et annihilation deux par deux donnent plusieurs fois la même contribution. Le facteur $1/n!$ apparaissant dans le développement de l'exponentielle (1.38) est alors exactement compensé.

1.3.3. Calcul des diagrammes de Feynman

Pour calculer la fonction de Green à l'ordre n, nous devons donc construire tous les diagrammes connexes comprenant au plus n vertex d'interaction $V_{\uparrow,\downarrow}$ représenté sur la figure (1.3).

Pour obtenir des expressions plus compactes, nous les écrivons dans l'espace de Fourier, c'est à dire en impulsion et en fréquence de Matsubara. Après avoir dessiné un diagramme d'ordre n, son expression analytique est obtenue en respectant les règles suivantes :

1. On commence tout d'abord par attribuer une quatre-impulsion $k_i = \{\mathbf{k_i}, \omega_{k_i}\}$ à chaque propagateur libre ↑ et ↓ en assurant la conservation de la quatre-impulsion à chaque nœud du diagramme. Les lignes entrante et sortante du diagramme ont

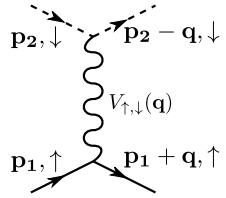


FIGURE 1.3.: Vertex d'interaction à deux corps.

la même quatre-impulsion k qui est celle de la fonction de Green d'ordre n que nous souhaitons calculer.

2. On donne un facteur $V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{q})$ à chaque ligne ondulée décrivant l'interaction entre deux fermions de spin différent et qui transfère une impulsion $\mathbf{q}$ entre les fermions incidents et diffusés.
3. On donne à chaque ligne fermionique, de spin σ et de quatre impulsion k_i, un facteur $\mathcal{G}_{0,\sigma}(k_i)$ (1.35).
4. On somme sur toutes les quatre-impulsions exceptée celle des pattes externes. $\sum_{k_i} = \int d^3k_i/(2\pi)^3 \sum_{\omega_{n_i}}/\beta$ à température finie en mettant un facteur $e^{i\omega_{n_i}0^+}$ pour chaque propagateur fermé sur lui même.
5. Pour finir, on attribue au diagramme un facteur $(-1)^{n+N}$ où N est le nombre de boucles de fermions.

On notera que pour un calcul à température nulle, nous devons utiliser l'expression des fonctions de Green libres (1.30) et la sommation sur les quatre-impulsions devient $\sum_{k_i} = \int d^3k_i/(2\pi)^3 \int_{-i\infty}^{i\infty} d\omega_i/(2i\pi)$. Pour illustrer ces règles, nous avons dessiné sur les figures (1.4a), (1.4b) et (1.4c) tous les diagrammes contribuant à l'ordre 2 de la fonction de Green. En appliquant les règles décrites ci-dessus, les trois contributions sont respectivement :

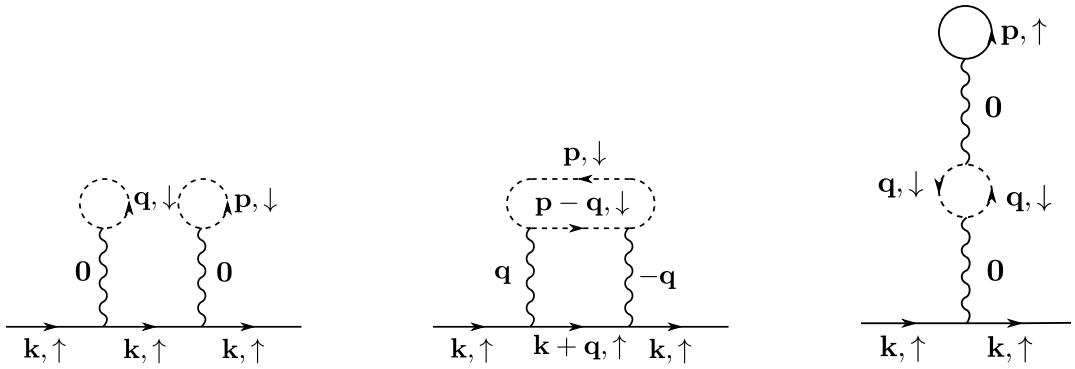
$$\mathcal{G}_{2a,\uparrow}(k) = [\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)]^3 [V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{0})]^2 \sum_{q,p} \mathcal{G}_{0,\downarrow}(q)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(p)\, e^{i\omega_{qn}0^+} e^{i\omega_{pn}0^+} \quad (1.43)$$

$$\mathcal{G}_{2b,\uparrow}(k) = -[\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)]^2 \sum_{q,p} V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{q})\, V_{\uparrow,\downarrow}(-\mathbf{q})\, \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k+q)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(p-q)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(p) \quad (1.44)$$

$$\mathcal{G}_{2c,\uparrow}(k) = [\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)]^2 [V_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{0})]^2 \sum_{q,p} [\mathcal{G}_{0,\downarrow}(q)]^2\, \mathcal{G}_{0,\uparrow}(p)\, e^{i\omega_{pn}0^+} \quad (1.45)$$

1.3.4. Self-énergie et équation de Dyson

La sommation de tous les diagrammes contribuant à la fonction de Green est une étape compliquée qui nécessite d'écrire tous les diagrammes d'ordre n. Il est possible de différencier les diagrammes connexes en deux catégories. Ceux qui sont divisibles en coupant une ligne de propagateur libre $\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)$ et ceux qui ne le sont pas. Par exemple, sur la figure (1.4a), on peut couper la ligne $(k,\uparrow)$ située entre les deux interactions afin d'obtenir deux fois le diagramme de Hartree représenté sur la figure (1.2b). Nous pouvons donc



(a) Diagramme (1.43). (b) Diagramme (1.44). (c) Diagramme (1.45).

FIGURE 1.4.: Diagrammes contribuant à l'ordre 2 de la fonction de Green (1.37).

décrire ce diagramme d'ordre 2 en "répétant" le diagramme d'ordre 1. Nous introduisons alors la self-énergie $\Sigma_\sigma(k)$ définie comme la somme de tous les diagrammes non divisibles en deux parties ayant deux pattes externes (entrante et sortante) de spin σ et de quatre-vecteur k. La fonction de Green est alors obtenue par l'équation diagrammatique représentée sur la figure (1.5).

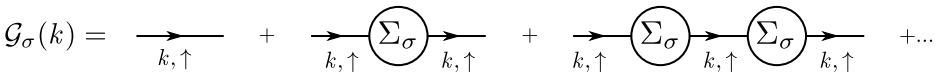


FIGURE 1.5.: Représentation diagrammatique de l'équation de Dyson.

Le grand intérêt est que l'on peut écrire cette équation de manière récursive en considérant le propagateur libre comme terme source et la self-énergie comme noyau. Son expression analytique est alors :

$$\mathcal{G}_\sigma(k) = \mathcal{G}_{0,\sigma}(k) + \mathcal{G}_{0,\sigma}(k)\,\Sigma_\sigma(k)\,\mathcal{G}_\sigma(k) \tag{1.46}$$

En réinjectant la fonction de Green, on retrouve bien la somme infinie de termes de la figure (1.5). On peut alors factoriser la fonction de Green et exprimer son inverse en fonction de la self-énergie. On montre, que connaissant la self-énergie, on peut calculer la fonction de Green par la relation :

$$\mathcal{G}_\sigma(k) = \frac{1}{i\omega_{kn} - \epsilon_\sigma(\mathbf{k}) + \mu_\sigma - \Sigma_\sigma(k)} \tag{1.47}$$

On montre que la self-énergie est une quantité complexe qui permet de déterminer le résidu, l'énergie et la masse effective des quasi-particules.

1.4. Problème à deux corps

Dans cette section, nous cherchons à caractériser l'amplitude de diffusion fermion-fermion en onde s. Nous montrons tout d'abord comment obtenir simplement celle-ci en résolvant l'équation de Schrödinger avec pseudo-potentiel. Puis, nous présentons une description diagrammatique de cette diffusion avec un potentiel de contact. Nous verrons aussi comment régulariser la divergence d'un potentiel de contact en utilisant l'opérateur T (1.9) et son lien avec l'amplitude de diffusion (1.11).

1.4.1. Équation de Schrödinger avec pseudo-potentiel

Afin de résoudre l'équation de Schrödinger, nous utilisons le pseudo-potentiel défini dans l'équation (1.24) afin d'éviter la divergence du laplacien à petite distance. En l'appliquant dans l'équation (1.4), on obtient :

$$\psi_E(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k_E r}} - a_{\uparrow,\downarrow}\alpha_E \frac{e^{ik_E r}}{r} \tag{1.48}$$

où $\alpha_E = \partial\left[r\psi_E(\mathbf{r})\right]/\partial r|_{r=0}$. L'amplitude de diffusion est le facteur devant l'onde sphérique diffusée et dépend de la valeur de α_E. C'est une quantité dépendant du comportement de la fonction d'onde à petite distance. En utilisant la définition de α_E et en l'appliquant à l'équation (1.48), on obtient la relation :

$$\alpha_E = 1 - a_{\uparrow,\downarrow}\alpha_E i k_E \tag{1.49}$$

L'amplitude de diffusion de diffusion fermion-fermion vaut alors :

$$f_s(k_E) = \frac{-1}{a_{\uparrow,\downarrow}^{-1} + ik_E} \tag{1.50}$$

A la limite d'énergie nulle, ce résultat (1.50) donne bien l'opposé de la longueur de diffusion et vérifie le théorème optique. La partie imaginaire de l'inverse de l'amplitude de diffusion est égale à l'opposé du vecteur d'onde.

1.4.2. Vertex de diffusion fermion-fermion

Nous considérons la diffusion dans le vide de deux particules fermioniques ($\uparrow$ et $\downarrow$) en interaction de contact, ayant des masses respectives $m_\uparrow$ et $m_\downarrow$.

Description diagrammatique

Le vertex T_2 décrivant la diffusion des deux particules s'écrit comme la somme de tous les diagrammes d'interaction possibles avec deux fermions incidents et deux fermions diffusés. On peut montrer que chaque boucle de fermion donne une contribution proportionnelle à la densité (voir par exemple, à la section (1.3), les diagrammes d'ordre 1 et

2) et la densité tend vers zéro à la limite thermodynamique. En effet, nous considérons une particule de chaque espèce dans le vide ($n_\sigma = N_\sigma/V$). Les seuls diagrammes non nuls sont donc ceux faisant intervenir les deux lignes de fermion incidentes. Le vertex peut s'écrire sous la forme d'une équation de Bethe-Salpeter et est représenté sur la figure (1.6). Le premier terme dans le membre de droite décrit le processus élémentaire le plus simple, c'est à dire l'interaction instantanée et de contact des deux particules via le potentiel V_c (1.22). Quant au second terme, il permet de décrire la répétition de ce processus élémentaire par récurrence. Nous constatons que cette équation diagrammatique est une somme infinie de diagrammes décrivant n interactions successives entre les particules $\uparrow$ et $\downarrow$.

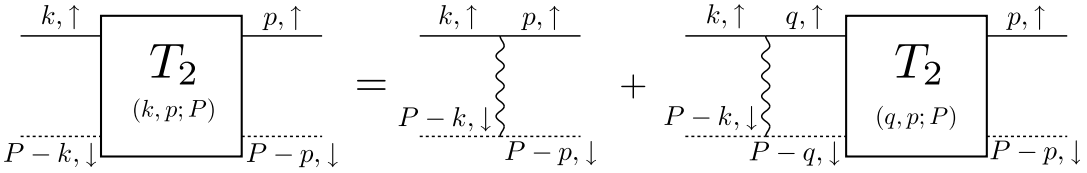


FIGURE 1.6.: Représentation diagrammatique du vertex de diffusion fermion-fermion

L'expression analytique correspondante s'écrit :

$$T_2(k,p;P) = V_c(k,p) - \sum_q V_c(k,q)\, G_{0,\uparrow}(q)\, G_{0,\downarrow}(P-q)\, T_2(q,p;P) \tag{1.51}$$

où $T_2(k,p;P)$ est le vertex de diffusion fermion-fermion et à température nulle $\sum_q = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega_q}{2\pi i}$. Les quatre-vecteurs k et p sont respectivement les quatre-impulsions incidente et diffusée. Alors que P est la quatre-impulsion totale. Le potentiel d'interaction élémentaire est noté $V_c(k,p)$. Comme nous l'avons déjà évoqué, le potentiel de contact provoque une divergence en l'origine, dans l'espace des positions, à cause du comportement en $1/r$ de la fonction d'onde. Pour l'instant, nous considérons qu'il dépend des vecteurs d'onde via une coupure.

Régularisation du potentiel de contact

Pour le régulariser, nous introduisons donc une coupure k_c à grande impulsion que nous ferons tendre vers l'infini, afin d'obtenir un potentiel de contact. On remplace le potentiel (1.22) par un potentiel séparable qui s'écrit dans l'espace des impulsions :

$$V_c(k,p) = g_{\uparrow,\downarrow}\theta(k_c - k)\,\theta(k_c - p) \tag{1.52}$$

où θ est la fonction de Heaviside. Dans cette expression (1.52), le potentiel dépend explicitement de la constante de couplage $g_{\uparrow,\downarrow}$ et de la coupure k_c qui tend vers l'infini. Nous allons expliquer comment relier ces deux quantités à la longueur de diffusion $a_{\uparrow,\downarrow}$ en utilisant le lien entre l'amplitude de diffusion et l'opérateur T (1.11).

Il faut remarquer que l'opérateur T fait intervenir une relation de récurrence (1.10) similaire à celle du vertex T_2 (1.51) où les termes sources dépendent du potentiel. L'intérêt

étant que nous savons relier l'opérateur T à l'amplitude de diffusion (1.11). On commence tout d'abord par écrire un élément quelconque de la matrice T que l'on note $T(\mathbf{k},\mathbf{p}) = \langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle$. En projetant (1.10) sur le bra $\langle \mathbf{k}|$, on obtient la relation fermée :

$$T(\mathbf{k},\mathbf{p}) = V_c(\mathbf{k}-\mathbf{p}) - 2m_{\uparrow,\downarrow}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{V_c(\mathbf{k}-\mathbf{q})\,T(\mathbf{q},\mathbf{p})}{q^2-p^2-i0^+} \tag{1.53}$$

Nous avons alors l'expression de l'amplitude de diffusion en utilisant le lien (1.11). En insérant l'expression du potentiel avec coupure (1.52), on peut alors identifier l'amplitude de diffusion obtenue au développement à basse énergie (1.20). On obtient alors la longueur de diffusion fermion-fermion et la portée effective en fonction de la constante de couplage et de la coupure :

$$\frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{2\pi a_{\uparrow,\downarrow}} = \frac{1}{g_{\uparrow,\downarrow}} + \sum_{\mathbf{k}}^{k<k_c}\frac{2m_{\uparrow,\downarrow}}{k^2} \tag{1.54}$$

et

$$r_e = \frac{4}{\pi k_c} \tag{1.55}$$

Cette dernière relation (1.55) montre qu'en faisant tendre la coupure k_c vers l'infini, cela consiste essentiellement à considérer la portée effective nulle, ce qui est justifié pour les gaz de fermions dilués. D'autre part, la relation (1.54) est essentielle pour nos calculs diagrammatiques et permet de régulariser les divergences dans les sommations, obtenues en prenant la limite de potentiel de contact.

Sommation sur les fréquences

Nous revenons à l'expression (1.51) en considérant un potentiel de contact (1.22). Nous constatons que le terme source ne dépend alors plus des variables $\mathbf{k}$ et $\mathbf{p}$. En réinjectant son expression dans le terme intégral, nous pouvons nous convaincre que T_2 ne dépend que de la quatre impulsion totale P. On peut alors diviser l'équation (1.51) par T_2 et par la constante de couplage $g_{\uparrow,\downarrow}$. En remplaçant cette dernière par l'équation (1.54), nous obtenons l'équation pour le vertex :

$$T_2(P)^{-1} = \frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{2\pi a_{\uparrow,\downarrow}} + \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_q}{2\pi i}G_{0,\uparrow}(q)\,G_{0,\downarrow}(P-q) - \frac{2m_{\uparrow,\downarrow}}{q^2}\right] \tag{1.56}$$

Pour effectuer l'intégration sur les fréquences, nous devons analyser les propriétés analytiques de l'intégrande. La fonction de Green $G_{0,\uparrow}(q)$ a un pôle en $\omega_q = \epsilon_\uparrow(\mathbf{q}) - i0^+$ alors que $G_{0,\downarrow}(P-q)$ a un pôle en $\omega_q = \Omega_P - \epsilon_\downarrow(\mathbf{P}-\mathbf{q}) + i0^+$. Ω_P étant situé sur l'axe réel, pour effectuer l'intégration sur les fréquences, nous refermons le contour dans le demi plan à partie imaginaire négative et nous utilisons le théorème des résidus. Puis, nous effectuons dans le premier terme de l'intégrande, le changement de variable

$\mathbf{q} \to \mathbf{q} + m_\uparrow/m_d\mathbf{P}$ afin d'obtenir :

$$T_2\left(P\right)^{-1} = \frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{2\pi a_{\uparrow,\downarrow}} + \int \frac{d^3q}{\left(2\pi\right)^3}\left[\frac{1}{\epsilon_{\uparrow,\downarrow}\left(\mathbf{q}\right) + \epsilon_d\left(\mathbf{P}\right) - \Omega_P - i0^+} - \frac{2m_{\uparrow,\downarrow}}{q^2}\right] \tag{1.57}$$

où $\epsilon_d(\mathbf{P})$ est l'énergie cinétique d'un dimère de masse $m_d = m_\uparrow + m_\downarrow$ d'impulsion $\mathbf{P}$. Nous constatons que le comportement divergent à grande impulsion $\mathbf{q}$ de l'intégrande est bien compensé par la sommation introduite via la relation (1.54) où la coupure tend vers l'infini dans la limite de potentiel de contact.

Expression analytique du vertex de diffusion fermion-fermion

Après intégration sur le vecteur d'onde $\mathbf{q}$, nous obtenons l'expression finale du vertex de diffusion fermion-fermion :

$$t_2\left(\mathbf{P}, \Omega_P\right) = \frac{2\pi/m_{\uparrow,\downarrow}}{1/a_{\uparrow,\downarrow} - \sqrt{2m_{\uparrow,\downarrow}\left[\epsilon_d\left(\mathbf{P}\right) - \Omega_P - i0^+\right]}} \tag{1.58}$$

Nous devons remarquer qu'en analysant les propriétés analytiques de l'intégrande de (1.51) en fonction de ω_q, on peut réaliser l'intégration sur les fréquences en gardant un potentiel quelconque mais instantané. En utilisant (1.51) et (1.53), nous pouvons écrire :

$$T_2\left[\left\{\mathbf{k}, \epsilon_\uparrow\left(\mathbf{k}\right)\right\}, \left\{\mathbf{p}, \epsilon_\downarrow\left(\mathbf{p}\right)\right\}; \left\{\mathbf{0}, \epsilon_{\uparrow,\downarrow}\left(\mathbf{p}\right)\right\}\right] = T\left(\mathbf{k}, \mathbf{p}\right) \tag{1.59}$$

Nous pouvons alors obtenir l'amplitude de diffusion en utilisant (1.11). Nous en déduisons que l'amplitude de diffusion en onde s vaut $-1/\left(1/a_{\uparrow,\downarrow} + ik\right)$. Nous constatons que cette relation est identique à celle obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger avec un pseudo potentiel (1.50).

Discussion du vertex

De l'expression (1.58), nous pouvons obtenir plusieurs informations. Tout d'abord, la racine du dénominateur montre qu'il existe une coupure lorsque la fréquence Ω_P est supérieure à l'énergie cinétique du dimère avec impulsion $\mathbf{P}$. On comprend que cela correspond au continuum des états de diffusion. De plus, ce vertex a un pôle lorsque la fréquence Ω_P est égale à $\epsilon_d\left(\mathbf{P}\right) - |E_b|$ où :

$$|E_b| = \frac{1}{2m_{\uparrow,\downarrow}a_{\uparrow,\downarrow}^2} \tag{1.60}$$

et a pour résidu :

$$Z = \frac{2\pi}{m_{\uparrow,\downarrow}^2 a_{\uparrow,\downarrow}} \tag{1.61}$$

Cette singularité correspond à l'état lié avec impulsion $\mathbf{P}$ décrit dans la section (1.2.3). Au voisinage de ce pôle le vertex se développe comme :

$$t_2\left(\mathbf{P},\Omega_P\right) \sim \frac{Z}{\Omega_P + |E_b| - \epsilon_d\left(\mathbf{P}\right) + i0^+} \tag{1.62}$$

Nous constatons que l'expression (1.62) décrit le propagateur d'une particule bosonique de masse m_d. Nous verrons naturellement apparaître cette expression dans l'étude de la collision dimère-dimère présentée au chapitre 3 et dans la limite BEC au chapitre 6.

Conclusion

Nous avons vu dans ce premier chapitre, que dans le régime de basse température, les collisions sont isotropes, entre fermions d'espèces différentes et caractérisées par un unique paramètre : la longueur de diffusion en onde s. Nous avons également décrit le modèle utilisé pour décrire les interactions dans les gaz de fermions froids dilués, et que des dimères bosoniques peuvent se former lorsque la longueur de diffusion est positive. Nous avons finalement présenté les techniques diagrammatiques afin de décrire le vertex d'interaction fermion-fermion.

Le système physique qui nous intéresse, dans cette première partie, est un gaz de fermions constitué de deux espèces de masses différentes et déséquilibré en populations. Nous considérons le régime de température nulle en présence d'un état lié. Les collisions dans ce gaz sont donc caractérisées par les longueurs de diffusion en onde s dimère-fermion et dimère-dimère.

Le chapitre 2 est consacré au calcul analytique de l'amplitude de diffusion dimère-fermion en onde s quand le rapport des masses entre les deux espèces est grand. Le chapitre 3 présente le calcul analytique de l'amplitude de diffusion dimère-dimère en onde s quand le rapport des masses est grand. Nous utiliserons pour ceci la méthode diagrammatique exacte en introduisant les vertex de diffusion dimère-fermion et dimère-dimère. Tous les développements sont comparés aux résultats numériques exacts et discutés.

Chapitre 2

Amplitude de diffusion dimère-fermion

Dans le premier chapitre, nous avons présenté les quantités d'intérêt pour décrire l'interaction dans un gaz d'atome froid, ainsi que les techniques diagrammatiques que nous pouvons appliquer pour étudier ces systèmes. Dans ce second chapitre, nous souhaitons calculer l'amplitude de diffusion entre un dimère (état lié dans la limite BEC entre deux fermions $\uparrow$ et $\downarrow$) et un fermion $\uparrow$ dans le vide. Nous obtenons un développement analytique de l'amplitude de collision quand le rapport de masse entre un fermion $\uparrow$ et un fermion $\downarrow$ est grand devant un [ACL10].

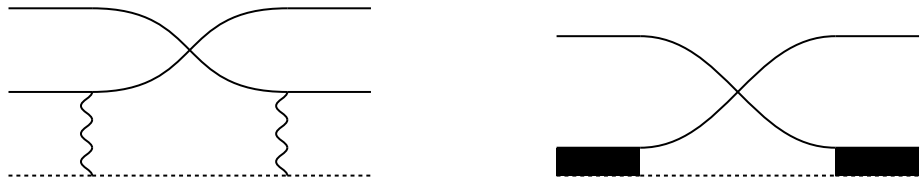
Ceci est effectué en développant l'équation pour le vertex de diffusion dimère-fermion en onde s, en puissance du rapport des masses. Nous proposons alors une solution approchée en nous ramenant à l'étude d'une équation de Schrödinger dans l'espace réel afin d'identifier le déphasage en onde s. La première section définit l'équation diagrammatique exacte pour le vertex. La section suivante décrit une solution approchée dans la limite de grand rapport des masses, quand l'énergie cinétique de la collision est nulle. Puis, dans la dernière section, nous donnons une expression analytique pour l'amplitude de diffusion dimère-fermion en onde s. Tous les résultats sont discutés et comparés aux résultats numériques exacts.

2.1. Équation intégrale exacte pour l'amplitude de diffusion

2.1.1. Description diagrammatique du vertex dimère-fermion

Lors de la collision des trois particules (considérons par exemple 2 particules $\uparrow$ et 1 particule $\downarrow$), le processus le plus simple est l'interaction d'un fermion $\uparrow$ avec un fermion $\downarrow$ via le potentiel d'interaction V, puis les deux fermions $\uparrow$ peuvent s'échanger afin que celui initialement libre interagisse à son tour avec le fermion $\downarrow$. Ce processus est représenté sur la figure (2.1a). Les lignes en pointillés représentent les fermions $\downarrow$ alors que les lignes pleines décrivent la propagation des fermions $\uparrow$. Afin de décrire toutes les interactions possibles entre deux fermions, nous pouvons substituer le vertex T_2, présenté à la section (1.4.2), au processus d'interaction à deux corps V. Ceci revient finalement

à échanger les fermions ↑, ce qui est représenté sur la figure (2.1b) et qui constitue le processus d'interaction le plus simple entre un dimère composite et un fermion libre. Nous représenterons, dans la suite de cette thèse, le vertex T_2 comme sur la figure (2.2).



(a) Diagramme d'interaction le plus simple entre trois fermions

(b) Diagramme d'interaction le plus simple entre un dimère composite et un fermion

FIGURE 2.1.: Processus d'interaction élémentaire



FIGURE 2.2.: Représentation graphique du vertex T_2.

Dans le vide, lors de l'interaction entre un dimère et un fermion ↑, le seul processus possible est donc l'échange d'un fermion de ce type. L'ensemble des diagrammes est donc la répétition de cet échange représenté sur la figure (2.3).

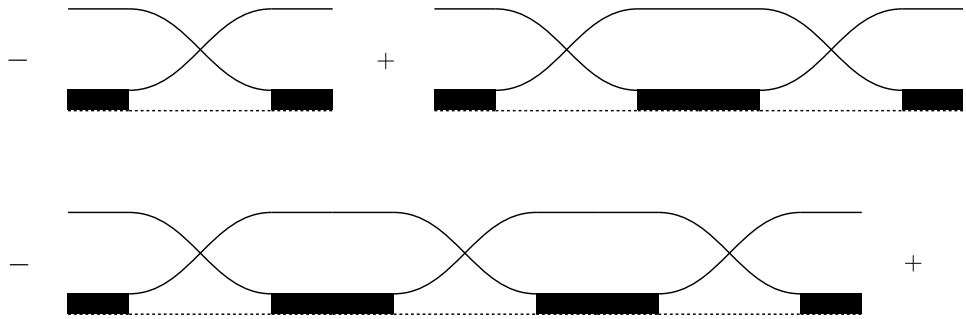


FIGURE 2.3.: Répétition du terme de l'échange des fermions ↑

Nous pouvons alors écrire une équation diagrammatique exacte pour le vertex de diffusion dimère-fermion ↑ noté $T_3^{\uparrow}$, représentée sur la figure (2.4), qui prend en compte cet échange et la répétition de celui-ci.

Les quatre-vecteurs $p_1 = \{\mathbf{p_1}, \omega_{p_1}\}$ et $p_2 = \{\mathbf{p_2}, \omega_{p_2}\}$ sont respectivement ceux de la particule incidente et diffusée, alors que $P = \{\mathbf{P}, \Omega_P\}$ est la quatre-impulsion totale du système composé des trois particules. Cela conduit à une équation de type Bethe-Salpeter qui a pour expression analytique :

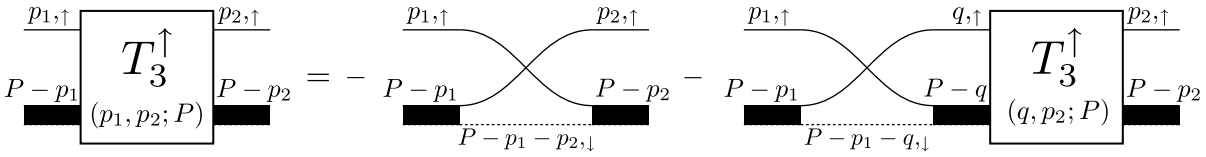


FIGURE 2.4.: Vertex de diffusion boson composite - fermion ↑

$$T_3^{\uparrow}(p_1,p_2;P) = -G_{0,\downarrow}(P-p_1-p_2) - \sum_q G_{0,\downarrow}(P-p_1-q)\,G_{0,\uparrow}(q)\,T_2(P-q)\,T_3^{\uparrow}(q,p_2;P) \quad (2.1)$$

où $q=\{\mathbf{q},\omega_q\}$. Afin de réaliser l'intégration sur la fréquence ω_q, nous devons analyser les propriétés analytiques de l'intégrande en fonction de ω_q. Dans le terme intégral, le vertex à deux corps et la fonction de Green du fermion ↓ sont des fonctions analytiques de ω_q dans le demi-plan complexe supérieur mais pas la fonction de Green du fermion ↑. Qu'en est-il de la fonction $T_3^{\uparrow}$? Nous pouvons voir dans l'équation (2.1) que le membre de droite est une fonction de ω_{p_1} analytique dans ce même demi plan. En effet, la seule dépendance en ω_{p_1} vient des fonctions de Green du fermion ↓ avec $G_0^{\downarrow}(Q-p_1)=[\Omega_Q-\omega_{p_1}-\epsilon_{\downarrow}(\mathbf{q}-\mathbf{p_1})-i0^+]^{-1}$. On en déduit que $T_3^{\uparrow}$ est une fonction de ω_{p_1} analytique dans le demi plan complexe supérieur. Nous pouvons effectuer l'intégration sur la fréquence ω_q en fermant le contour dans le demi plan complexe supérieur (partie imaginaire positive) et calculer le résidu associé au pôle de la fonction de Green du fermion ↑ en $\omega_q=\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{q})$. Il en résulte que la fréquence de la particule ↑ échangée lors de l'interaction doit être prise égale à l'énergie cinétique du fermion ↑. En physique nucléaire, on appelle cela considérer la fréquence "on the shell". Le $T_3^{\uparrow}$ intervenant dans l'intégrale ne dépendant plus de la fréquence, afin de calculer ce vertex, nous pouvons également prendre la fréquence de la particule ↑ incidente "on the shell" et par symétrie "verticale" (en échangeant p_1 et p_2), nous prenons également la fréquence de la particule ↑ diffusée égale à son énergie cinétique. On considère finalement l'équation :

$$\begin{aligned} T_3^{\uparrow}(\{\mathbf{p_1},\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{p_1})\},\{\mathbf{p_2},\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{p_2})\};\{\mathbf{P},\Omega_P\}) &= -G_{0,\downarrow}(\{\mathbf{P}-\mathbf{p_1}-\mathbf{p_2},\Omega_P-\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{p_1})-\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{p_2})\}) \\ &\quad -\sum_q G_{0,\downarrow}(\{\mathbf{P}-\mathbf{p_1}-\mathbf{q},\Omega_P-\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{p_1})-\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{q})\}) \\ &\quad \times T_2(\{\mathbf{P}-\mathbf{q},\Omega_P-\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{q})\})\,T_3(\{\mathbf{q},\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{q})\},\{\mathbf{p_2},\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{p_2})\};\{\mathbf{P},\Omega_P\}) \quad (2.2) \end{aligned}$$

2.1.2. Amplitude de diffusion élastique en onde s

Dans la suite, on prend le centre de masse immobile, ce qui revient à poser $\mathbf{P}=\mathbf{0}$. Concernant l'énergie totale du système Ω_P dans le référentiel du centre de masse, elle est égale à la somme des énergies interne et cinétique. Le dimère composite représentant l'état lié de deux fermions a une énergie de liaison négative $-|E_b|$ et les particules diffusées ont leur propre énergie cinétique. Il est important de remarquer que l'on doit

impérativement fixer cette énergie par rapport aux particules diffusées et non pas par rapport aux particules incidentes, car il intervient dans notre équation intégrale (2.2) une sommation sur les impulsions incidentes. On doit donc les laisser libres afin de résoudre cette équation. Nous pouvons donc écrire en toute généralité que l'énergie totale du système est $\Omega_P = -|E_b| + \epsilon_\uparrow(\mathbf{p_2}) + \epsilon_d(\mathbf{p_2})$ où nous décrivons, respectivement, la somme des énergies de l'état lié, cinétique du fermion diffusé et cinétique du dimère diffusé. De plus, le vertex (2.2) est relié à la longueur de diffusion par la relation suivante [BKK$^+$06] :

$$ZT_3^{\uparrow}(0, 0; \{\mathbf{0}, -|E_b|\}) = g_{d,\uparrow} = \frac{2\pi a_{d,\uparrow}}{m_{d,\uparrow}} \tag{2.3}$$

où dans la formule (2.3), le vertex de diffusion est évalué à quatre-impulsions des fermions incidents et diffusés nulles et à énergie totale égale à l'énergie de liaison du dimère composite. Nous proposons alors le changement de fonction inconnue suivant :

$$\begin{aligned}\frac{4\pi a_3(\mathbf{p_1}; \mathbf{p_2})}{\mathbf{p_1}^2 - \mathbf{p_2}^2 - i0^+} = &-T_2\left[\{-\mathbf{p_1}, -|E_b| + \epsilon_\uparrow(\mathbf{p_2}) + \epsilon_d(\mathbf{p_2}) - \epsilon_\uparrow(\mathbf{p_1})\}\right] \\ &T_3\left(\{\mathbf{q}, \epsilon_\uparrow(\mathbf{q})\}, \{\mathbf{p_2}, \epsilon_\uparrow(\mathbf{p_2})\}; \{\mathbf{0}, -|E_b| + \epsilon_\uparrow(\mathbf{p_2}) + \epsilon_d(\mathbf{p_2})\}\right)\end{aligned} \tag{2.4}$$

On aboutit ainsi à la bonne relation avec la longueur de diffusion $a_{d,\uparrow} = a_3(\mathbf{0}, \mathbf{0})$ en prenant les limites d'impulsions incidente et diffusée nulles. De plus, cette fonction $a_3(\mathbf{p_1}; \mathbf{p_2})$ est solution de l'équation intégrale donnée par Skorniakov et Ter-Martirosian [STM57] pour l'amplitude de diffusion élastique du système à trois corps composé de fermions de masses égales, généralisée ici à des fermions de masse quelconque.

Comme nous nous intéressons aux problèmes de diffusion à très basse énergie, nous avons vu que la collision se fera principalement dans l'onde s. Nous pouvons alors projeter cette fonction sur la base des harmoniques sphériques afin de découpler la diffusion dans les orbites de différents moments angulaires. Le détail de cette projection dans les ondes partielles est expliqué dans l'annexe (A.1). On obtient alors une nouvelle équation intégrale pour la fonction $a_3^s(p_1, p_2)$ qui représente l'amplitude de diffusion dimère-fermion $\uparrow$ avec moment cinétique orbital nul (onde s). Cette fonction ne dépend alors plus de l'angle entre les vecteurs impulsions des fermions diffusés et incidents.

$$\begin{aligned}a_3^s(p_1; p_2) = \frac{p_1^2 - p_2^2}{4\pi} &T_2\left[\{-p_1, -|E_b| + \epsilon_\uparrow(p_2) + \epsilon_d(p_2) - \epsilon_\uparrow(p_1)\}\right] \\ &\times \left\{\kappa_s(p_1, p_2; p_2) + \sum_{\mathbf{q}} \kappa_s(p_1, q; p_2) \frac{4\pi a_3^s(q; p_2)}{q^2 - p_2^2 - i0^+}\right\}\end{aligned} \tag{2.5}$$

où $\kappa_s(p_1, q; p_2)$ est la projection sur le premier polynôme de Legendre du noyau de l'équation (voir équation (A.8)).

Il est important de remarquer à ce stade, que l'amplitude de diffusion est complexe si l'on considère le vecteur d'onde de la particule diffusée non nul. C'est à dire que l'on considère une énergie totale du système supérieure à l'énergie de l'état liée. A énergie

cinétique nulle, on retrouve la longueur de diffusion (2.3) qui est une quantité réelle. On peut alors séparer les parties réelle et imaginaire de l'amplitude de diffusion (2.5) afin de réécrire cette équation intégrale en deux équations couplées que l'on résout numériquement. En posant $a_3^s(p_1,p_2) = \xi(p_1,p_2) + i\eta(p_1,p_2)$, on obtient le système d'équations donné dans la section (A.2). C'est la généralisation des équations pour l'amplitude de diffusion élastique en onde s, dérivées par Skorniakov et Ter-Martirosian, pour des masses différentes entre fermions $\uparrow$ et $\downarrow$. Il est important de remarquer que si l'énergie cinétique des particules incidentes est supérieure à l'énergie de l'état lié, la dissociation en trois particules libres est possible, et n'est pas décrite dans le vertex de la figure (2.4). Si l'énergie totale est positive, l'amplitude de diffusion décrite ici n'est pas exacte. Étant intéressé par les propriétés à basse énergie, nous nous limitons donc à une énergie totale négative. Nous avons la condition :

$$\Omega_P = -|E_b| + \epsilon_d(\mathbf{p_2}) + \epsilon_\uparrow(\mathbf{p_2}) < 0 \tag{2.6}$$

2.2. Calcul de la longueur de diffusion

Comme nous l'avons vu auparavant, la longueur de diffusion est obtenue en calculant l'amplitude de diffusion en onde s dans la limite d'énergie cinétique nulle. Partant de l'équation (2.5), nous pouvons adimensionner et simplifier en choisissant le vecteur d'onde de la particule diffusée égal à zéro, soit $p_2 = 0$. Nous devons alors résoudre l'équation intégrale suivante :

$$f(k) = \frac{m_{d,\uparrow}}{m_{\uparrow,\downarrow}}\left(1+\sqrt{1+\frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{m_{d,\uparrow}}k^2}\right)\left[\frac{1}{1+k^2} - \frac{m_\downarrow}{m_{\uparrow,\downarrow}2\pi}\int_0^\infty dq \frac{f(q)}{kq}\log\left(\frac{1+q^2+k^2+2\frac{m_\uparrow}{m_d}qk}{1+q^2+k^2-2\frac{m_\uparrow}{m_d}qk}\right)\right] \tag{2.7}$$

où nous avons introduit la fonction sans dimension $f(k) = a_3^s(k/a_{\uparrow,\downarrow}, 0)/a_{\uparrow,\downarrow}$.

Dans la suite, nous allons présenter les résultats analytiques dans le cas de la collision de deux particules légères avec une particule lourde qui peut être considéré comme une impureté. Puis, nous développons cette équation dans la limite opposée où les deux fermions de même espèce sont les plus lourds. En revenant dans l'espace des positions, nous établissons le lien avec une équation de Schrödinger. Nous présentons une solution approchée de celle-ci ainsi qu'une expression analytique de la longueur de diffusion. Les résultats obtenus sont comparés aux résultats numériques exacts de l'équation (2.7).

2.2.1. Résultat analytique pour un fermion de masse infinie

Dans la limite où deux masses très légères interagissent avec une masse $\downarrow$ lourde, nous pouvons développer l'équation (2.7) en puissance de $m_\uparrow/m_\downarrow$. Quand ce rapport des masses est nul, l'équation se réduit à :

$$f(k) = \left(1 + \sqrt{1+k^2}\right)\left[\frac{1}{1+k^2} - \frac{2}{\pi}\int_0^{+\infty} dq \frac{f(q)}{1+k^2+q^2}\right] \tag{2.8}$$

Nous avons alors trouvé la solution non triviale de cette équation (2.8) :

$$f(k) = 1/\left(1+k^2\right) \tag{2.9}$$

La longueur de diffusion est obtenue en prenant la limite d'impulsion nulle et vaut donc $a_{\uparrow,\downarrow}$, ce qui confirme les résultats numériques.

Dans ce problème, le fermion $\downarrow$ infiniment lourd est immobile fixé par exemple à l'origine. Il agit alors comme une "impureté" statique. Quand une particule légère est loin du centre de diffusion, nous pouvons alors écrire la fonction d'onde de ce problème comme le produit d'un état lié $e^{-r/a_{\uparrow,\downarrow}}/r$ et d'un état de diffusion à énergie nulle $1-a_{\uparrow,\downarrow}/r$. En notant $\mathbf{r_1}$ et $\mathbf{r_2}$ la position des deux fermions légers, la fonction d'onde antisymétrique par échange de ces deux particules s'écrit donc :

$$\psi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) \sim \frac{e^{-r_1/a}}{r_1}\left(1 - \frac{a_{\uparrow,\downarrow}}{r_2}\right) - \frac{e^{-r_2/a}}{r_2}\left(1 - \frac{a_{\uparrow,\downarrow}}{r_1}\right) \tag{2.10}$$

En suivant [STM57], nous définissons la fonction d'onde dimère-fermion comme $\phi(\mathbf{r}) = \lim_{r_1\to 0} r_1\psi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r}) = 1 - a_{\uparrow,\downarrow}/r + a_{\uparrow,\downarrow}/r \times e^{-r/a_{\uparrow,\downarrow}}$. Le comportement asymptotique de $\phi(r) \sim_{r\to\infty} 1 - a_{d,\uparrow}/r$, nous montre immédiatement le même résultat : la longueur de diffusion dimère-fermion est égale à la longueur de diffusion fermion-fermion. Il est à noter qu'en calculant la fonction d'onde ϕ dans l'espace des impulsions, nous trouvons :

$$a_3^s(k,0) = \frac{1}{a_{\uparrow,\downarrow}\left(a_{\uparrow,\downarrow}^{-2} + \mathbf{k}^2\right)} \tag{2.11}$$

Ce qui confirme le résultat précédent.

2.2.2. Développements pour un fermion léger

A partir de maintenant, nous nous intéressons à la limite où les deux fermions $\uparrow$ sont bien plus lourds que le fermion $\downarrow$. Nous définissons un petit paramètre $\epsilon = m_\downarrow/m_\uparrow$ égal au rapport des masses entre le fermion léger et un fermion lourd. Nous développons l'équation intégrale (2.7) en puissances de ϵ au premier ordre. La fonction $f(k)$ étant paire, nous pouvons de plus simplifier l'équation obtenue suite à ce développement. Ce qui conduit à :

$$\epsilon f(k) = (1+\epsilon)\frac{1}{1+k^2} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi k}\frac{f(q)}{q}\log\left[1+(k-q)^2\right] + \epsilon\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dq}{\pi}f(q)\frac{1}{1+(k-q)^2} \quad (2.12)$$

Où nous avons ici négligé les termes quadratiques en k venant de la racine carrée, même si ces termes peuvent jouer un rôle à grand vecteur d'onde. Cela paraît raisonnable car nous sommes intéressés par la longueur de diffusion, déterminée par la valeur de la fonction f à impulsion nulle. Nous obtenons une équation intégrale unidimensionnelle qui contient toutes les informations nécessaires afin d'obtenir la longueur de diffusion d'un dimère composite et d'un fermion ↑ dans la limite de grand rapport de masse $m_\uparrow/m_\downarrow$. Nous pouvons alors résoudre numériquement les équations intégrales (2.7) et (2.12) puis prendre la limite d'impulsion nulle. Les résultats sont représentés sur la figure (2.5) où nous pouvons voir que notre simplification décrit le bon comportement asymptotique de la longueur de diffusion et donne également d'excellents résultats quand les masses sont du même ordre.

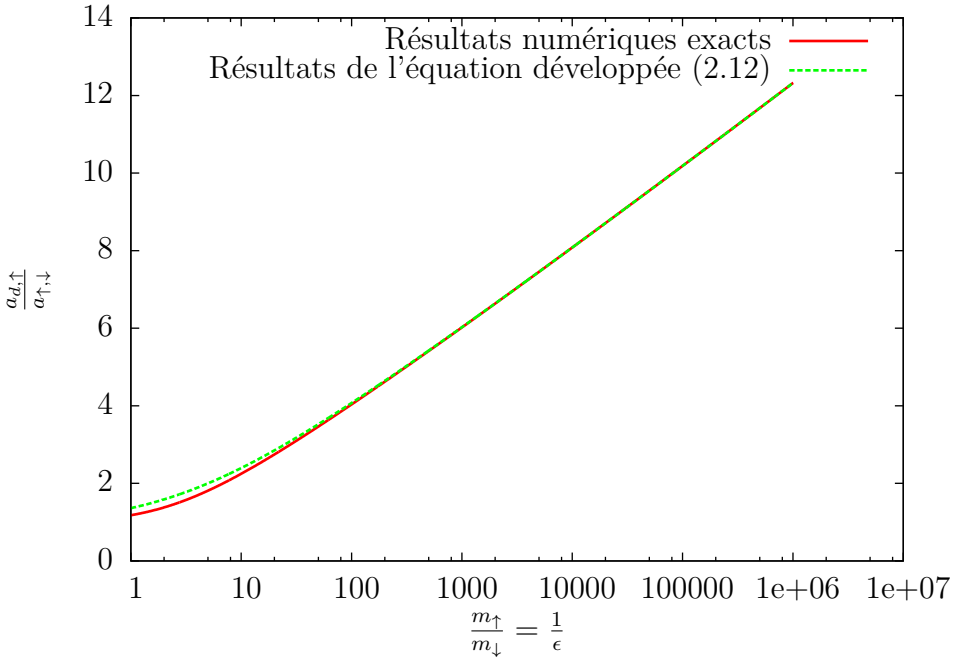


FIGURE 2.5.: Longueur de diffusion dimère - fermion ↑ adimensionnée en fonction du rapport des masses. La courbe pleine rouge est le résultat exact donné par l'équation (2.7) alors que la courbe en tiret vert est le résultat donné par notre équation développée (2.12).

Nous remarquons également que dans cette dernière équation intervient un produit de convolution avec la fonction $f(q)$. Dans la prochaine section, nous allons utiliser la transformation de Fourier afin d'obtenir un simple produit dans l'espace des positions.

2.2.3. Lien avec l'équation de Schrödinger

En toute généralité, nous pouvons relier la fonction d'onde dimère-fermion dans l'espace des impulsions à l'amplitude de diffusion par l'équation (1.8). Nous obtenons ainsi la fonction d'onde du système dimère-fermion dans l'espace des positions en fonction d'une intégrale dépendant de l'amplitude de diffusion. Cette relation générale peut alors être simplifiée dans la limite qui nous intéresse dans cette section, c'est à dire, la limite d'énergie totale égale à celle de l'état lié et en onde s. La fonction d'onde en onde s à énergie nulle s'exprime alors en fonction de $f(k)$ sous la forme :

$$\phi_0(r) = 1 - \frac{1}{\pi r}\int_{-\infty}^{+\infty} dk \sin(kr)\frac{f(k)}{k} \tag{2.13}$$

où r est la distance relative entre le dimère composite et le fermion $\uparrow$ car l'impulsion k intervenant dans l'intégrale est l'impulsion relative des particules incidentes. Le premier terme représente simplement l'onde plane incidente alors que le second décrit l'onde sphérique diffusée. Nous calculons donc la transformée de Fourier de l'équation (2.12) afin de faire intervenir l'expression intégrale obtenue dans l'équation (2.13) . Nous obtenons alors une équation différentielle du second degré pour la fonction d'onde en onde s :

$$\epsilon\phi_0''(r) + \epsilon\phi_0'(r)\frac{2 - 2e^{-r} + re^{-r}}{r(1-e^{-r})} - \phi_0(r)\frac{e^{-r}(1-\epsilon)}{r(1-e^{-r})} = 0 \tag{2.14}$$

Afin d'obtenir la longueur de diffusion, nous devons étudier le comportement de la fonction d'onde à grande distance devant le centre de diffusion. L'équation différentielle se simplifie alors dans cette limite :

$$\epsilon\left[\phi_0''(r) + \frac{2}{r}\phi_0'(r)\right] - \phi_0(r)\frac{e^{-r}}{r} = 0, \quad r \gg 1 \tag{2.15}$$

où on reconnaît un laplacien radial à trois dimension. Cette équation (2.15) n'est rien d'autre qu'une équation de Schrödinger avec un potentiel ayant un comportement asymptotique de type Yukawa répulsif. Nous devons remarquer que cette équation peut être obtenue dans l'approximation de Born-Oppenheimer pour une distance entre le dimère composite et le fermion grande devant la longueur de diffusion fermion-fermion.

Afin de résoudre l'équation différentielle (2.14), il nous reste à écrire deux conditions aux limites.

2.2.4. Conditions aux limites

La première condition est obtenue en analysant le comportement à grande distance devant le centre de diffusion de la fonction d'onde. On sait d'après l'équation (1.16) que le comportement asymptotique de cette fonction d'onde permet d'obtenir le déphasage, et donc à énergie nulle, la longueur de diffusion. Soit :

$$\phi_0(r) \sim_{r\to\infty} 1 - a_{d,\uparrow}/(r a_{\uparrow,\downarrow}) \tag{2.16}$$

Cette condition peut aussi être obtenue par la définition de la longueur de diffusion qui est la valeur de la fonction $f(k)$ à impulsion nulle. En confrontant les équations (2.13) et (2.16) on trouve bien :

$$a_{d,\uparrow}/a_{\uparrow,\downarrow} = f(0) = \lim_{r\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\pi} \sin(kr) \frac{f(k)}{k} \tag{2.17}$$

car $\sin(kr)/(\pi k) \to \delta(k)$ quand r tend vers l'infini.

Nous avons donc à calculer la fonction d'onde $\phi(r)$ et sa limite quand le fermion $\uparrow$ et le dimère sont séparés d'une distance infinie. A l'inverse, quand ceux ci sont au même endroit, la fonction d'onde doit s'annuler à cause du principe de Pauli. En effet, cette fonction étant antisymétrique par échange des deux fermions $\uparrow$, elle sera donc nulle quand la distance r tend vers zéro, car les trois particules seront au même endroit. On obtient alors la deuxième condition :

$$\lim_{r\to 0} \phi_0(r) = 0 \tag{2.18}$$

Cette condition, peut être obtenu en étudiant l'équation intégrale à grand vecteur d'onde avant simplification (2.7) (car nous avons volontairement négligé les termes décrivant le comportement de l'amplitude de diffusion à grande impulsion), c'est à dire à très petite distance du centre de diffusion. En développant cette équation quand k tend vers l'infini, nous constatons que l'amplitude de diffusion doit décroître comme l'inverse de l'impulsion. Or si cela est le cas, l'intégrale devient divergente ! Par ce même développement, le terme intégral donne aussi un terme du même ordre qui doit donc compenser le premier afin de rendre l'intégrale convergente. On obtient donc la condition suivante qui est équivalente à l'équation (2.18) :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) = \pi \tag{2.19}$$

Nous avons une équation différentielle du second degré (2.14) parfaitement définie avec deux conditions aux limites (2.16) et (2.18). Dans la section suivante, nous allons discuter des solutions de cette équation différentielle.

2.2.5. Solution approchée

Limite singulière de masses infinies

Pour avoir une idée de la solution recherchée, nous commençons par présenter un cas limite. Nous étudions la solution de l'équation différentielle pour deux masses $\uparrow$ infinies. D'après l'équation (2.14), la solution triviale est $\phi_0(r) = 0$. Nous pouvons alors calculer

la transformée de Fourier inverse intervenant dans l'équation (2.13). Nous obtenons ainsi :

$$f(k) = -\pi k \delta'(k) \tag{2.20}$$

Nous pouvons vérifier que cette fonction est bien solution de l'équation intégrale (2.12) avec $\epsilon = 0$ mais n'est pas unique. En effet, $\pi\delta(k)$ est aussi solution ! Nous verrons que cette dégénérescence disparaît lorsque les masses sont finies. Ces solutions singulières donnent une longueur de diffusion mal définie, mais il est intéressant de remarquer que ces solutions sont concentrées à l'origine et il est raisonnable de penser que la solution à masse finie décroit rapidement quand l'impulsion augmente.

Approximation WKB

Si nous considérons des masses finies dont le rapport devient grand, nous pouvons appliquer l'approximation WKB à l'équation (2.14) afin d'obtenir une solution. Il est pratique d'effectuer le changement de fonction $\phi_0(r) = u_0(r) / \left(r\sqrt{1-e^{-r}}\right)$. A grande distance r entre le dimère et le fermion, $u_0(r)$ est la fonction d'onde radiale en onde s qui doit avoir le comportement asymptotique $r - a_{d,\uparrow}/a_{\uparrow,\downarrow}$. Nous avons fait une analyse détaillée de la nouvelle équation différentielle obtenue dans la publication [ACL10]. Nous avons mis en évidence que pour un distance grande devant $-\log(\epsilon) \to_{\epsilon\to 0} \infty$, la dérivée seconde de la fonction d'onde radiale sera essentiellement nulle. Nous pouvons alors simplifier la nouvelle équation différentielle pour cette fonction donnant les bonnes caractéristiques de la diffusion pour un grand rapport des masses. Nous devons alors résoudre :

$$\epsilon u_0''(r) = q(r)\, u_0(r), \quad q(r) = \frac{e^{-r}}{r\left(1-e^{-r}\right)} \tag{2.21}$$

Avec comme conditions aux limites :

$$\lim_{r\to 0} u_0(r) = 0 \tag{2.22}$$

$$\lim_{r\to\infty} u_0(r) = r - a_{d,\uparrow}/a_{\uparrow,\downarrow} \tag{2.23}$$

Afin de vérifier la condition aux limites (2.22), nous obtenons la solution WKB suivante :

$$u_0^{(\mathrm{WKB})}(r) = \alpha \left[q(r)/\epsilon\right]^{-1/4} e^{\int_r^{+\infty} dx \sqrt{q(x)/\epsilon}} \tag{2.24}$$

qui malheureusement ne permet pas d'obtenir le bon comportement asymptotique (2.23) car la fonction $q(r)$ s'annule à l'infini. En effet, nous avons alors affaire à un point tournant dans cette limite et nous devons résoudre directement l'équation (2.21) près du point tournant puis relier les solutions.

Solution approchée à grande distance

Lorsque le rapport des masses devient suffisamment grand, la solution WKB reste valable jusqu'à une distance, elle même grande devant un. Nous nous plaçons alors dans le régime où $r \gg 1$ et nous pouvons simplifier l'équation (2.21) en négligeant le terme exponentiel du dénominateur de q. Nous faisons le changement de variable $x = 2e^{-r/2}$ afin d'obtenir l'équation :

$$x^2 u_0''(x) + x u_0'(x) - \frac{x^2}{L(x)} u_0(x) = 0, \quad L(x) = 2\epsilon \log(2/x) \tag{2.25}$$

Nous ne connaissons pas de solution exacte de cette équation, mais nous pouvons remarquer dans le domaine qui nous intéresse, c'est à dire quand $x \to 0$, que la fonction L est lentement variable par rapport à x^2. Nous considérons la fonction L quasi constante et nous la notons $L_0 = L(x_0)$, où x_0 est une constante. En changeant la variable x en $\sqrt{L_0} y$ nous obtenons une équation différentielle ayant pour solution les fonctions de Bessel modifiées $I_0(y)$ et $K_0(y)$. Quant à la fonction obtenue dans l'approximation WKB (2.24) et en restant cohérent avec notre traitement de la fonction L constante, nous devons la développer pour $y \to 0$ afin de la relier à nos solutions de type Bessel :

$$u_0^{(\mathrm{WKB})}(y) \sim_{y\to 0} \alpha \frac{e^{-y}}{\sqrt{y}} \tag{2.26}$$

Nous en déduisons que seule la solution en $K_0(y) \sim_{y\to 0} \sqrt{\pi/2}\frac{e^{-y}}{\sqrt{y}}$ est acceptable, et nous pouvons relier les deux fonctions. Nous devons ensuite développer cette fonction de Bessel à grande distance afin de vérifier la condition (2.23), nous en déduisons ainsi la constante $\alpha = \sqrt{2\pi}$. Ce qui conduit à la solution approchée à grande distance devant le centre de diffusion :

$$u_0^{(\mathrm{Bessel})}(r) = 2K_0\left(\frac{2}{\sqrt{\epsilon r_0}} e^{-r/2}\right) \tag{2.27}$$

où $r_0 = 2\log(2/x_0)$ est une constante qui dépend du rapport des masses et est bien plus grande que un. En développant la solution (2.27) à grande distance, nous pouvons identifier avec la formule (2.23), la longueur de diffusion dimère-fermion en onde s :

$$a_{d,\uparrow}/a_{\uparrow,\downarrow} = -\log(\epsilon) - \log(r_0) + 2\gamma \tag{2.28}$$

où γ est la constante d'Euler. Nous devons remarquer que cette fonction n'est qu'une solution approchée car nous avons considérer la fonction L quasi-constante. En fonction de la distance, cette approximation revient à considérer un potentiel de type Yukawa répulsif à grande distance, et à remplacer la décroissance en $1/r$ par $1/r_0$. Nous avons toutefois obtenu le comportement logarithmique dominant. Il nous reste à évaluer un

terme non négligeable qui dépend de la constante $r_0 \gg 1$.

Discussion de la solution

Nous allons maintenant discuter la solution approchée en fonction de la distance entre le dimère composite et le fermion ↑, qui peut être vu comme la distance entre les deux fermions lourds. Sur la figure (2.6), nous avons récapitulé les différents comportements.

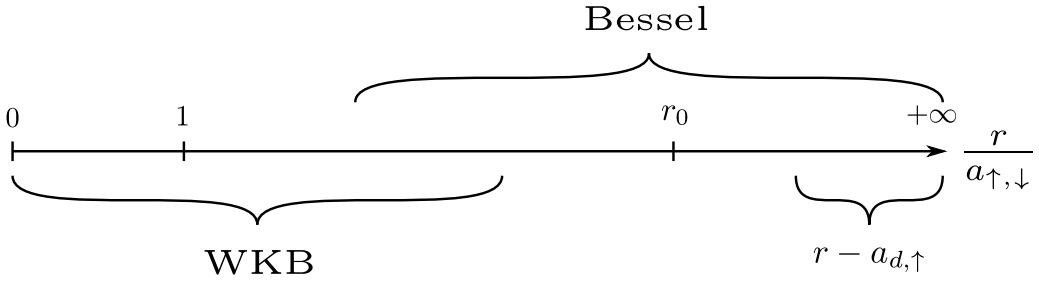


FIGURE 2.6.: Différentes solutions de l'équation différentielle (2.21) pour la fonction d'onde radiale en onde s

Si la distance est bien plus petite que la longueur r_0, la solution WKB nous montre que la fonction d'onde est, dans cette limite, petite comme $e^{-g(r)\sqrt{m_\uparrow/m_\downarrow}}$ où $g(r)$ est une fonction positive dépendant de la distance entre les particules. Cela justifie que la contribution dominante de la diffusion intervient pour des distances r bien plus grande que la longueur de diffusion fermion-fermion. La solution est alors très peu sensible aux détails de la collision à petite distance. Dans ce cas, l'utilisation de l'approximation $L(x) \approx L_0$ est naturelle. Dans l'espace des positions, cela revient à dire que la décroissance exponentielle du potentiel de type Yukawa domine celle en l'inverse de la distance. De plus, en regardant l'équation différentielle (2.21), nous pouvons dès maintenant supposer que la distance caractéristique r_0 est obtenue lorsque $r_0 e^{r_0}\epsilon$ est de l'ordre de l'unité. En effet, la fonction d'onde change de comportement lorsque celle-ci est de l'ordre de sa dérivée seconde. Le comportement asymptotique est alors bien décrit par la fonction de Bessel K_0. Cette solution devrait donc être une excellente approximation de la fonction d'onde quelque soit la distance entre le dimère et le fermion ↑.

Dans la section suivante, nous allons voir comment évaluer la distance caractéristique r_0 et en déduire une expression analytique pour le comportement asymptotique de la longueur de diffusion dans la limite de grand rapport des masses et comparer ces résultats à la solution numérique du problème exact (2.7).

2.2.6. Développements analytiques et résultats numériques

Dans l'équation (2.28), nous avons vu que la longueur de diffusion diverge logarithmiquement en fonction du rapport des masses plus un terme non négligeable en $\log(r_0)$ où r_0 est une distance caractéristique grande devant la longueur de diffusion fermion-fermion. Une première approche en vue de déterminer cette longueur consiste à revenir à l'équation différentielle (2.21) et d'intégrer la dérivée seconde deux fois. En effectuant, une intégration par parties, nous arrivons à la relation suivante :

$$\epsilon u_0(r) = r\int_0^r dx q(x) u_0(x) - \int_0^r dx x q(x) u_0(x) \tag{2.29}$$

Nous savons également que la fonction d'onde radiale a le comportement à grande distance devant le centre de diffusion $r - a_{d,\uparrow}/a_{\uparrow,\downarrow}$. En prenant la limite de distance infinie dans les bornes des intégrales, on en déduit une nouvelle formule pour calculer la longueur de diffusion dimère-fermion donnée par le rapport de ces deux intégrales [ACL10]. Même si nous ne connaissons pas l'allure exacte de la fonction d'onde radiale, nous voyons dans les intégrales de (2.29) que la fonction d'onde est coupée par la fonction $q(r)$ qui tend très rapidement vers zéro. Notre solution approchée devrait donc être valable sur tout le domaine d'intégration. Un premier essai peut être effectué avec la fonction obtenue dans l'approximation WKB (2.24). En utilisant la méthode du col, nous obtenons une expression de la longueur de diffusion seulement à l'ordre dominant en $-\log(\epsilon)$. Nous ne pouvons pas obtenir les termes suivants car la contribution dominante vient d'un domaine trop près de la fin de validité de cette approximation. Nous pouvons alors utiliser la solution (2.27) et effectuer le changement de variable $y = 2/\sqrt{\epsilon x e^x}$. Nous restons cohérent avec notre traitement quasi constant dans la fonction de Bessel et nous ne gardons que le terme dominant dans l'élément d'intégration. Nous obtenons l'expression :

$$\frac{a_{d,\uparrow}}{a_{\uparrow,\downarrow}} = \frac{\int_0^\infty dy y x(y) K_0(y)}{\int_0^\infty dy y K_0(y)} \tag{2.30}$$

où $x(y)$ est la fonction obtenue en inversant le changement de variable. Elle satisfait la relation $x(y) = 2\log(2) - \log(\epsilon) - 2\log(y) - \log[x(y)]$. La fonction solution de cette équation est également appelée fonction W de Lambert définie comme $W(x) e^{W(x)} = x$. On a donc ici $x(y) = W[4/(y^2\epsilon)]$. L'intégrale intervenant au dénominateur de (2.30) vaut un et est donnée dans [AS65]. Nous obtenons alors pour la longueur de diffusion dimère-fermion l'expression intégrale :

$$\frac{a_{d,\uparrow}}{a_{\uparrow,\downarrow}} = \int_0^\infty dy y W\left(\frac{4}{y^2\epsilon}\right) K_0(y) \tag{2.31}$$

Dans l'expression (2.31), nous constatons que la contribution principale est lorsque y est de l'ordre de un, à cause de la décroissance exponentielle de la fonction de Bessel. D'autre part, dans la limite de grand rapport des masses, l'argument de la fonction W de Lambert devient grand et nous pouvons utiliser le développement asymptotique de cette fonction $W(x) \sim_{x\to\infty} \log(x) - \log[\log(x)]$. En ne conservant que le premier terme, nous pouvons effectuer l'intégration exactement en utilisant $\int_0^\infty dy y \log(y) K_0(y) = \log(2) - \gamma$ [AS65]. Nous obtenons à l'ordre zéro dans ce développement :

$$\frac{a_{d,\uparrow}^{(0)}}{a_{\uparrow,\downarrow}} = -\log(\epsilon) + 2\gamma \tag{2.32}$$

Nous obtenons ainsi seulement le terme logarithmique dominant. En prenant en compte le second terme du développement de la fonction de Lambert $\log[\log(4/(y^2\epsilon)]$, nous ne pouvons pas réaliser l'intégration exactement mais nous avons remarqué que la contribution majoritaire est lorsque y est de l'ordre de l'unité. Nous négligeons alors sa contribution et pour rester cohérent, nous devons négliger le 4 du numérateur. Ces deux termes sont effectivement dominés par le rapport des masses intervenant au numérateur. Nous obtenons à l'ordre suivant le développement :

$$\frac{a_{d,\uparrow}^{(1)}}{a_{\uparrow,\downarrow}} = -\log(\epsilon) + 2\gamma - \log[-\log(\epsilon)] \tag{2.33}$$

Nous obtenons alors une correction supplémentaire à la divergence logarithmique non négligeable à grand rapport des masses. Ces résultats sont représentés sur la figure (2.7). Plusieurs remarques sont à faire. Tout d'abord, nous constatons que l'intégrale (2.31) décrit très bien le comportement de la longueur de diffusion quel que soit le rapport des masses. Le développement (2.32) donne le terme dominant de la divergence logarithmique et celui à l'ordre suivant (2.33) donne le bon comportement asymptotique. Finalement, le terme en $\log[-\log(\epsilon)]$ a un défaut qui est de faire diverger la longueur de diffusion pour des masses identiques. Nous allons voir comment améliorer ce résultat quel que soit le rapport des masses.

Comme nous avons vu, ce nouveau terme est important quand le rapport des masses devient grand. De celui-ci nous pouvons extraire la distance caractéristique r_0, en comparant les équations (2.33) et (2.28), qui est de l'ordre de $-\log(\epsilon)$. Nous devons remarquer que ce résultat est très cohérent avec l'argument donné précédemment et affirmant que la grandeur caractéristique est définie par $r_0 e^{r_0}\epsilon$ de l'ordre de l'unité. En effet, en développant ce critère, nous obtenons à l'ordre dominant $r_0 \sim -\log(\epsilon)$. Pour aller plus loin, nous proposons alors de décrire cette distance caractéristique par $r_0 e^{r_0}\epsilon = A$ où A est un nombre à déterminer de l'ordre de l'unité. Nous en déduisons alors une nouvelle expression pour la longueur de diffusion dépendant d'un paramètre que nous pouvons obtenir en fittant les résultats $\frac{a_{d,\uparrow}}{a_{\uparrow,\downarrow}} = -\log(\epsilon) + 2\gamma - \log\left[W\left(\frac{A}{\epsilon}\right)\right]$. Nous constatons alors en effectuant le fit de cette fonction par rapport à l'intégrale (2.31), que A converge numériquement vers une valeur proche de $e^{2\gamma}$. Nous en déduisons alors la distance caractéristique $r_0 \sim_{\epsilon\to\infty} 2\gamma - \log(\epsilon)$ et nous proposons une expression analytique approchée de la longueur de diffusion :

$$\frac{a_{d,\uparrow}}{a_{\uparrow,\downarrow}} \approx \log(\epsilon) + 2\gamma - \log[\log(\epsilon) + 2\gamma] \tag{2.34}$$

Ce résultat (2.34) donne le bon comportement asymptotique (2.33) et décrit remar-

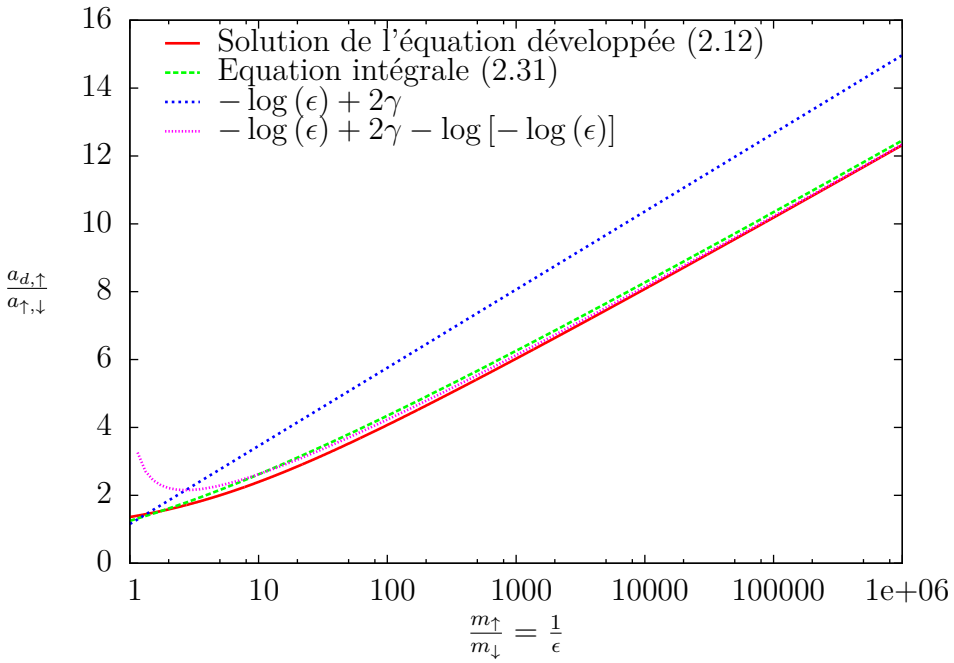


FIGURE 2.7.: Solutions approchées de la longueur de diffusion. La courbe pleine rouge est le résultat de l'équation intégrale développée (2.12), la courbe en tiret long verte est donnée par l'équation intégrale (2.31). Le terme logarithmique dominant du développement est donné par la courbe en tirets courts bleus mais ne décrit pas correctement le comportement asymptotique alors que la courbe en pointillés roses le décrit correctement.

quablement bien la longueur de diffusion dimère-fermion quel que soit le rapport des masses. Ceci est représenté sur la figure (2.8).

2.3. Calcul de l'amplitude de diffusion

Dans cette section, nous allons présenter un calcul pour l'amplitude de diffusion dimère-fermion dans la limite de grand rapport de masse. Nous avons vu précédemment les simplifications apparaissant à grand rapport de masse. Notamment que la probabilité de trouver les deux masses lourdes à une distance de l'ordre de $a_{\uparrow,\downarrow}$, est exponentiellement faible en puissance du rapport des masses. Il apparaît une distance caractéristique que nous avons notée $r_0 \sim a_{d,\uparrow}$. Les propriétés de la collision à petite distance ne sont plus importantes et seul le comportement pour des distances de l'ordre de r_0 est dominant. Nous allons voir que cette idée reste valable pour le calcul de l'amplitude de diffusion.

Afin d'obtenir cette fonction, nous devons maintenant considérer l'impulsion p_2 intervenant dans l'équation intégrale (2.5) non nulle. En effet, l'amplitude de diffusion décrit la probabilité de voir une particule incidente d'énergie finie diffusée à grande distance avec la même énergie. L'équation intégrale ne faisant intervenir qu'une sommation sur le vecteur d'onde incident p_1, p_2 est dans ce problème un paramètre fixé définissant l'énergie de la collision. Nous devons donc résoudre cette équation puis prendre la limite où

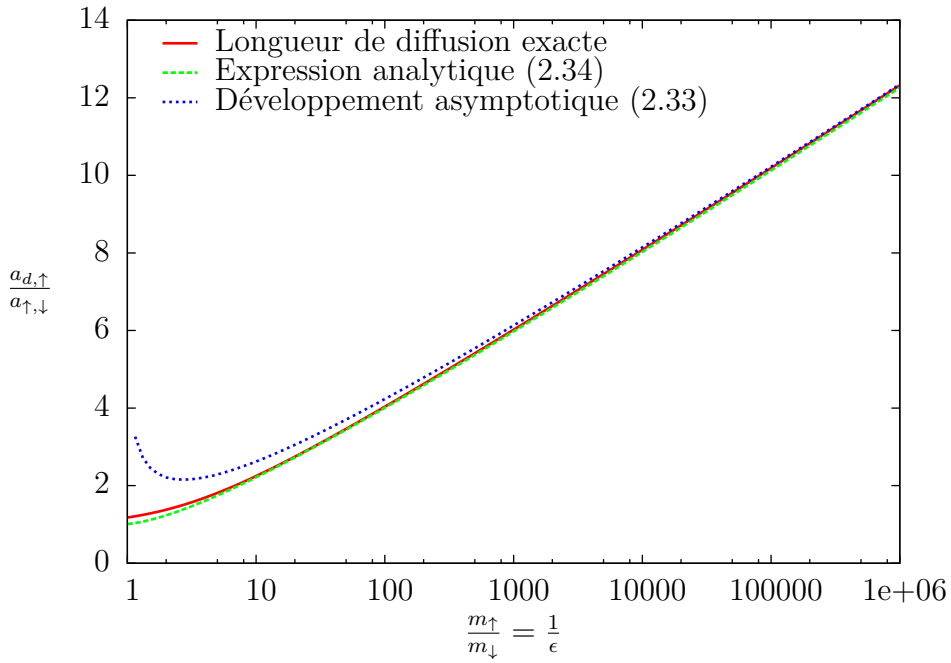


FIGURE 2.8.: Comparaison entre les développements asymptotiques et les résultats numériques exacts.

l'impulsion des particules incidentes est égale à l'impulsion de celles diffusées.

2.3.1. Équation à énergie finie pour un fermion léger

Nous introduisons donc une nouvelle fonction sans dimension $g_{p_2}(p_1) = a_3^s(p_1/a_{\uparrow,\downarrow}; p_2/a_{\uparrow,\downarrow})/a_{\uparrow,\downarrow}$ et nous développons comme précédemment l'équation (2.5) en puissance du rapport des masses au premier ordre. Nous obtenons l'équation suivante :

$$\epsilon g_{p_2}(p_1) = \frac{1}{4p_1p_2}\log\left[\frac{1+(p_1+p_2)^2}{1+(p_1-p_2)^2}\right] + \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dqq}{2\pi p_1}\frac{g_{p_2}(q)}{q^2-p_2^2-i0^+}\log\left[1+(p_1-q)^2\right] \tag{2.35}$$

Nous avons négligé ici les termes d'ordre ϵ du membre de droite. Comme dans le calcul de la longueur de diffusion où nous avions négligé ces termes plus loin dans le calcul, nous pouvons vérifier numériquement que ceux-ci n'ont aucune importance ici aussi. Ces termes jouent un rôle à grande impulsion, c'est à dire à petite distance, en régularisant la divergence du potentiel. Mais comme nous l'avons vu, les détails à courte distance n'ont aucune influence. Cette équation est très similaire à l'équation (2.12) à une différence près, qui est que l'amplitude de diffusion est une quantité complexe.

D'autre part, nous avons discuté du fait que lorsque l'énergie cinétique des trois particules est plus grande que l'énergie de l'état lié, le dimère peut alors se dissocier. Dans cette limite, nous pouvons développer la condition (2.6) et en adimensionnant les quantités, nous obtenons :

$$2\epsilon p_2^2 < 1 \tag{2.36}$$

En suivant les idées développées dans la section précédente, nous allons établir le lien entre la fonction d'onde dimère-fermion dans l'espace des positions et une intégrale faisant intervenir la transformée de Fourier de l'amplitude de diffusion. Nous obtiendrons alors une nouvelle équation de Schrödinger.

2.3.2. Fonction d'onde et déphasage

A énergie finie, nous pouvons relier la fonction d'onde du système à l'amplitude de diffusion (1.8). Puis nous projetons cette équation sur le premier polynôme de Legendre afin d'obtenir la fonction d'onde en onde s. Nous obtenons pour la fonction d'onde radiale en onde s :

$$u_{p_2}(r) = \frac{\sin(p_2 r)}{p_2} - \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dq q \sin(qr)\, \frac{g_{p_2}(q)}{q^2 - p_2^2 - i0^+} \tag{2.37}$$

Comme à énergie nulle, il suffit d'étudier la fonction d'onde loin du centre de diffusion pour en déduire les propriétés de diffusion, celle-ci est la somme d'une onde plane incidente et d'une onde sphérique diffusée dont le déphasage détermine complètement l'amplitude de diffusion. Ce comportement asymptotique s'écrit sous la forme :

$$u_{p_2}(r) \sim_{r\to\infty} \frac{\sin[p_2 r + \delta_0(p_2)]}{p_2} \tag{2.38}$$

où $\delta_0(p_2)$ est le déphasage en onde s à impulsion p_2. Une fois que nous aurons déterminé le déphasage, nous en déduirons l'amplitude de diffusion par la relation (1.18). Nous pouvons remarquer dans ce que nous avons écrit jusqu'à présent, qu'à la limite d'impulsion diffusée nulle, nous retrouvons les équations développées à la section précédente. En effet, la longueur de diffusion est liée au déphasage à impulsion nulle par la relation $a_{d,\uparrow} = -\lim_{p_2\to 0} \delta_0(p_2)/p_2$.

2.3.3. Solution approchée de l'équation de Schrödinger

Nous calculons la transformée de Fourier de notre équation (2.35) afin d'obtenir une équation de Schrödinger pour la fonction d'onde radiale en onde s. Nous pouvons écrire cette équation différentielle pour des distances grandes devant la longueur de diffusion fermion-fermion :

$$-\epsilon u''_{p_2}(r) + \frac{e^{-r}}{r} u_{p_2}(r) = \epsilon p_2^2 u_{p_2}(r), \quad \forall\, r \gg 1 \tag{2.39}$$

Nous retrouvons une équation de Schrödinger avec un potentiel de type Yukawa répulsif à grande distance, avec ici, un terme d'énergie non nulle dépendant de l'impulsion des particules diffusées. Nous devons remarquer que cette équation peut être obtenue dans l'approximation de Born-Oppenheimer. Pour le comportement asymptotique qui nous intéresse, nous effectuons à nouveau l'approximation $e^{-r}/r \sim e^{-r}/r_0$ dans (2.39). À énergie nulle, r_0 dépendait seulement du rapport des masses, mais maintenant elle peut également dépendre de l'impulsion des particules diffusées. En effectuant le changement de variable $z = 2/\sqrt{r_0 e^r \epsilon}$, nous obtenons l'équation différentielle de type Bessel :

$$u''_{p_2}(z)\, z^2 + u'_{p_2}(z)\, z - u_{p_2}(z)\left[z^2 + (2ip_2)^2\right] = 0 \tag{2.40}$$

Cette nouvelle équation différentielle a deux solutions possibles K_{2ip_2} et I_{2ip_2} mais afin que la fonction d'onde radiale s'annule quand les trois fermions sont au même endroit nous ne pouvons ici aussi retenir que la solution en K_{2ip_2}. Comme précédemment, nous pouvons faire une analyse plus détaillée en gardant tous les termes du développement dans l'équation différentielle (2.35), trouver une solution de type WKB à petite distance et la relier à nos fonctions de Bessel modifiées. Nous obtenons ainsi une solution approchée à grand rapport des masses :

$$u_{p_2}(r) = \alpha K_{2ip_2}\left(\frac{2}{\sqrt{r_0 e^r \epsilon}}\right) \tag{2.41}$$

2.3.4. Résultats analytiques et numériques

Nous développons alors cette expression à grande distance devant le centre de diffusion et identifions le déphasage en onde s à énergie finie avec la relation (2.38). Nous obtenons :

$$\delta_0(p_2) = \arg\left[i\Gamma(2ip_2)\, e^{ip_2 \log(\epsilon r_0)}\right] \tag{2.42}$$

De la connaissance de ce déphasage, nous avons alors déterminé l'amplitude de diffusion en onde s. En utilisant la formule (1.18), nous obtenons le développement analytique suivant :

$$a^s_{d,\uparrow}(p_2, p_2) = \frac{i}{2p_2}\left\{1 + e^{2i\arg\left[\Gamma(2ip_2)e^{ip_2\log(\epsilon r_0)}\right]}\right\} \tag{2.43}$$

À grand rapport des masses et pour des énergies suffisamment faibles, nous pouvons conserver l'approximation (2.33) $r_0 \sim -\log(\epsilon)$. Nous comparons alors les développements analytiques (2.42) et (2.43) à la solution numérique exacte de l'équation intégrale (2.5). Sur les figures (2.9) et (2.10), nous avons représenté pour deux rapports des masses le module de l'amplitude de diffusion et le sinus du déphasage en onde s.

Nous pouvons constater un excellent accord avec les résultats exacts pour une petite impulsion devant l'inverse de la longueur de diffusion. En effet, pour des énergies plus

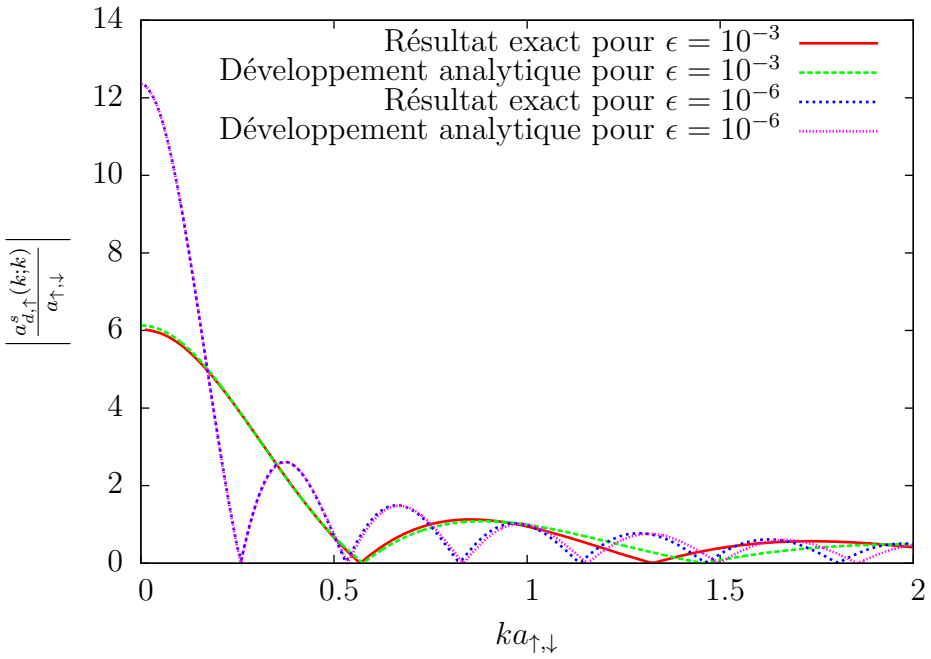


FIGURE 2.9.: Module de l'amplitude de diffusion en onde s en fonction de l'impulsion. Comparaison entre le développement analytique et le résultat numérique exact pour différents rapports des masses. La courbe en trait plein rouge est obtenue en résolvant l'équation intégrale du problème exact pour un rapport des masses de 10^{-3} et celle en tirets courts bleues pour un rapport des masses de 10^{-6}. Le développement analytique est représenté en tirets longs verts pour un rapport des masses de 10^{-3} et en pointillés roses pour un rapport des masses de 10^{-6}.

élevées, les détails de l'interaction à courte distance, que nous avons négligée, ont une influence. Nous pouvons tout de même obtenir les propriétés de collision déterminantes à très basse énergie.

2.3.5. Quantités physiques pour la diffusion dimère-fermion à basse énergie

Physique d'Efimov

Dans la publication [Isk10], l'auteur suggère que l'apparition de zéros dans la fonction intervenant dans l'équation de Skorniakov et Ter-Martirosian [STM57] est due à l'apparition d'états liés d'Efimov. Nous pouvons infirmer cette conclusion car le noyau en onde s ne présente aucune singularité. Nous avons analysé numériquement les valeurs propres du noyau "complet", c'est à dire celui où l'énergie totale est égale à la somme de l'énergie cinétique des particules et de l'état lié. Nous ne trouvons aucune valeur propre égale à 1 quel que soit le rapport des masses. Cette méthode a été utilisée dans [BKK$^+$06] pour des masses égales. Nous avons effectué une analyse similaire pour le noyau projeté dans l'onde $l = 1$ et dans ce cas, nous pouvons trouver des états liés à trois corps quand le

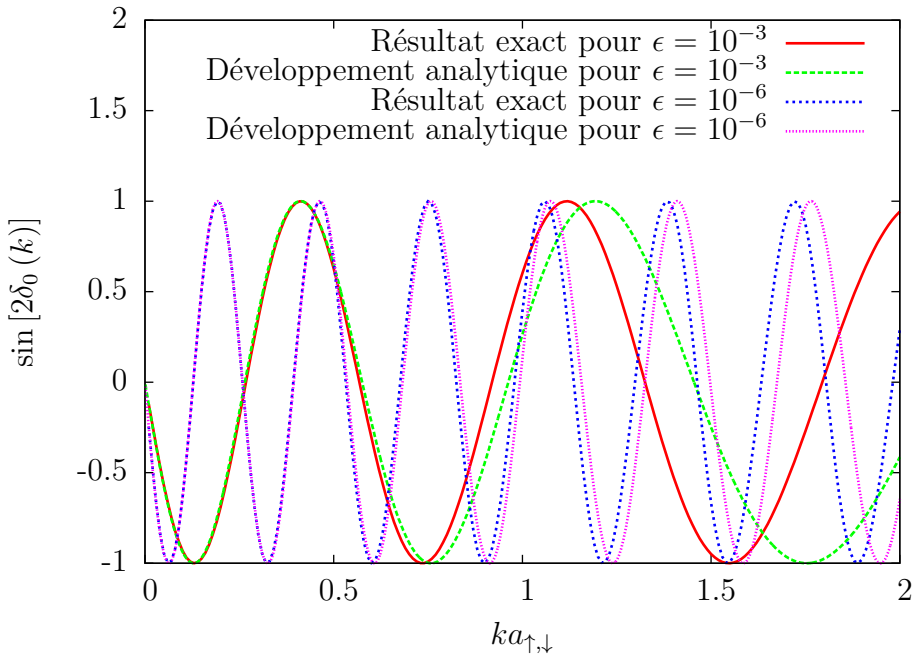


FIGURE 2.10.: Sinus du déphasage en onde s en fonction de l'impulsion. Comparaison entre le développement analytique et le résultat numérique exact pour différents rapports des masses. La courbe en trait plein rouge est obtenue en résolvant l'équation intégrale du problème exact pour un rapport des masses de 10^{-3} et celle en tirets courts bleues pour un rapport des masses de 10^{-6}. Le développement analytique est représenté en tirets longs verts pour un rapport des masses de 10^{-3} et en pointillés roses pour un rapport des masses de 10^{-6}.

rapport des masses augmente. Mais dans le cas de la diffusion en onde s, les noyaux sont réguliers et la résolution numérique des équations peut être effectuée et ne révèle pas l'existence d'états liés à trois corps d'Efimov.

Longueur de diffusion en onde s

Dans ce chapitre, nous avons montré comment obtenir des développements analytiques pour les propriétés de la diffusion à basse énergie entre un dimère composite et un fermion. Nous avons obtenu des expressions analytiques pour la longueur de diffusion dans les limites de grand rapport des masses. Cette longueur vaut essentiellement 1 lorsque deux des trois fermions sont très légers par rapport à la troisième particule. Dans l'autre limite, la longueur de diffusion diverge logarithmiquement en fonction du rapport des masses (2.33) mais il existe également une contribution grande devant la longueur de diffusion fermion-fermion croissante comme $\log[\log(m_\uparrow/m_\downarrow)]$. Ces résultats analytiques sont comparés avec les résultats numériques exacts sur la figure (2.11).

Nous obtenons un excellent accord entre les développements asymptotique et les résultats numériques exacts

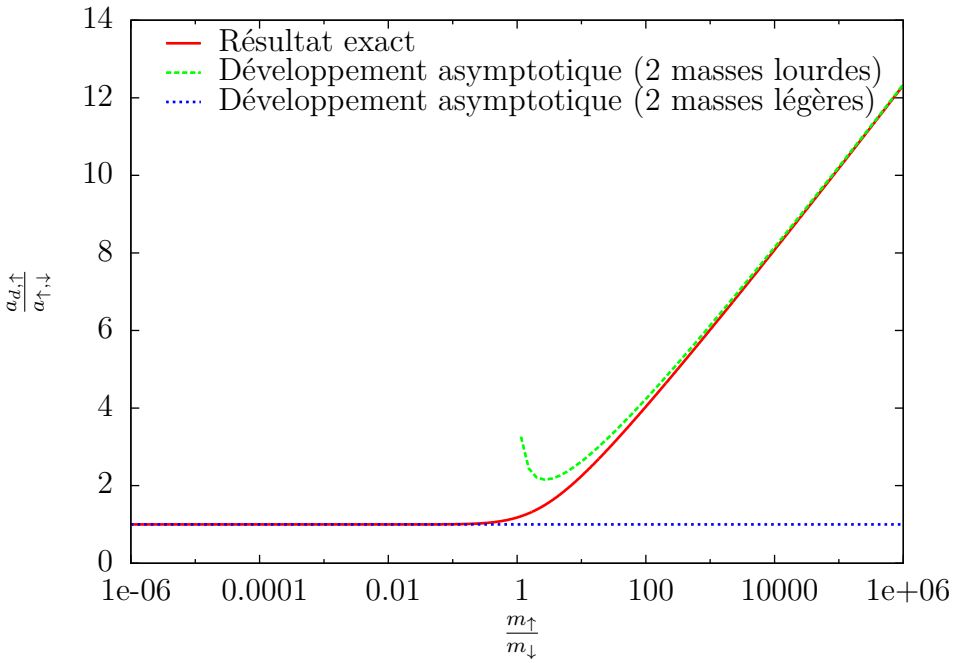


FIGURE 2.11.: Longueur de diffusion en onde s en fonction du rapport des masses $m_\uparrow/m_\downarrow$. La courbe rouge est le résultat exact décrit par l'équation (2.5). La courbe en tirets longs verts est le développement asymptotique donné par la relation (2.33) alors que la courbe en tirets courts bleus est le résultat de la section (2.2.1).

Portée effective

Nous avons vu à la section (1.1.5) que le développement au second ordre à basse énergie de l'amplitude de diffusion (1.20) définit la portée effective. Nous devons noter que le premier ordre décrit le théorème optique qui est implicitement vérifié dans notre solution (2.43) car nous avons utilisé le lien entre le déphasage qui est une quantité réelle et l'amplitude de diffusion (1.18).

Notre expression analytique (2.43) étant valable à petite impulsion, nous développons son inverse au second ordre afin d'en extraire la portée effective dimère-fermion induite. Nous obtenons alors l'expression :

$$r_e^s \sim_{\epsilon\to 0} \frac{2\left(a_{d,\uparrow}^s\right)^3 - 16\zeta(3)}{3\left(a_{d,\uparrow}^s\right)^2} \sim \frac{2}{3}a_{d,\uparrow}^s \tag{2.44}$$

Nous obtenons alors dans la limite de grand rapport des masses que la portée effective de cette diffusion induite par la composition interne fermionique du dimère est comparable à la longueur de diffusion dimère-fermion et que son comportement asymptotique vaut 2/3 de celle-ci à grand rapport des masses.

Absence de diffusion pour certaines énergies

Nous constatons sur la figure (2.9) l'annulation du module de l'amplitude de diffusion pour certaines énergies caractéristiques. Il n'y a pas de diffusion pour ces énergies, les particules "ne se voient pas". Nous pouvons développer, en utilisant la formule de Stirling, l'expression analytique (2.43) et nous obtenons à l'ordre le plus bas :

$$\left|a^s_{d,\uparrow}(k,k)\right| \sim \left|\frac{\sin\left(ka_{d,\uparrow}\right)}{k}\right| \tag{2.45}$$

Le premier zéro de l'amplitude intervient donc pour une impulsion k_0 :

$$k_0 = \pi/a_{d,\uparrow} \tag{2.46}$$

Les zéros suivants interviennent approximativement pour des multiples de ce vecteur d'onde. Nous pouvons alors calculer numériquement l'amplitude de diffusion exacte et identifier les impulsions k_0 où s'annulent cette fonction. Les impulsions k_0 sont représentées sur la figure (2.12) en fonction du rapport des masses et comparées au développement analytique (2.46). Comme nous avons vu précédemment notre méthode ne permet pas d'obtenir l'amplitude de diffusion pour des énergies trop élevées (2.6). En effet, pour des énergies trop importantes, il faut prendre en compte la possibilité de dissociation du dimère.

Nous constatons que le développement analytique (2.46) est excellent à grand rapport des masses. Nous pouvons aussi vérifier dans cette limite, que les absences de diffusion se produisent bien pour des multiples du premier zéro. D'autre part, pour des masses égales se phénomène n'apparaît pas. Nous obtenons qu'il faut un rapport des masses au moins égal à 15.3 pour observer l'apparition d'un premier zéro dans l'amplitude de diffusion.

Rapport des masses expérimentalement réalisable

Pour tester expérimentalement nos résultats avec des atomes alcalins, il faudrait considérer une mixture d'Yterbium 171 ou 173 avec du Lithium 6. Nous résolvons les équations exactes pour le couple $^{173}\mathrm{Yb}-^{6}\mathrm{Li}$ afin de le comparer à notre développement analytique. Les résultats sont représentés sur la figure (2.13) où nous nous sommes limités à des énergies inférieures à l'énergie de dissociation.

Nous constatons que notre développement a ses limites. Le premier zéro est décrit par notre solution mais sa position n'est pas en bon accord avec le résultat numérique exact. Concernant la longueur de diffusion en onde s, nous pouvons évaluer l'erreur à une dizaine de pourcents. Comme suggéré dans [PAP+07], l'utilisation d'un réseau optique pour piéger les atomes lourds, permettrait d'accroître la masse effective de ceux-ci. Il serait alors possible de tester notre développement expérimentalement.

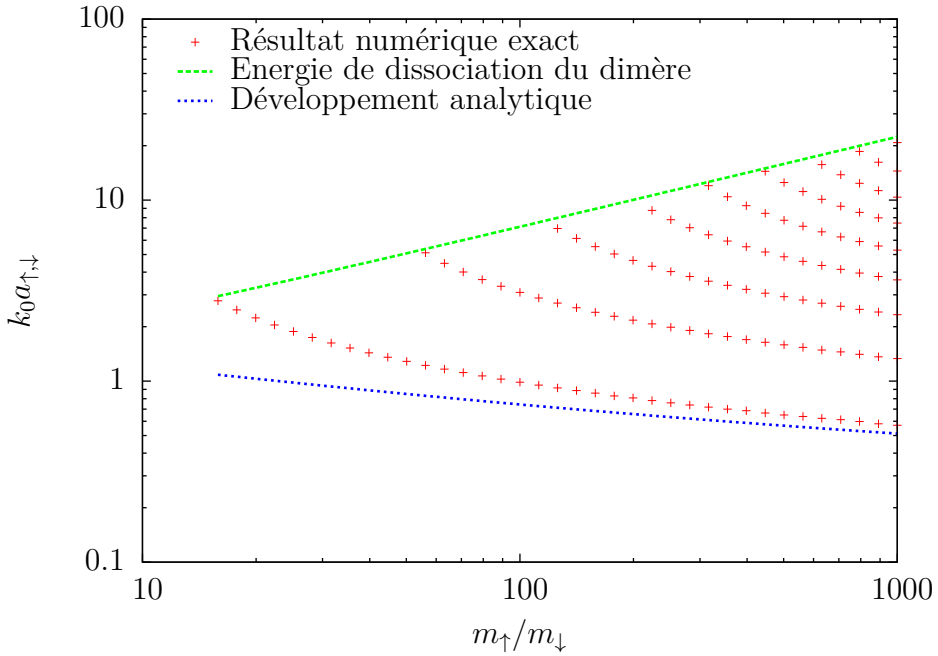


FIGURE 2.12.: Zéros de l'amplitude de diffusion en fonction de l'impulsion et du rapport des masses. Les zéros obtenus par la résolution des équations couplées exactes sont représentés par les croix rouges. La ligne en tirets longs verts est la ligne de dissociation du dimère. Le comportement analytique du premier zéro est la ligne en tirets courts bleues.

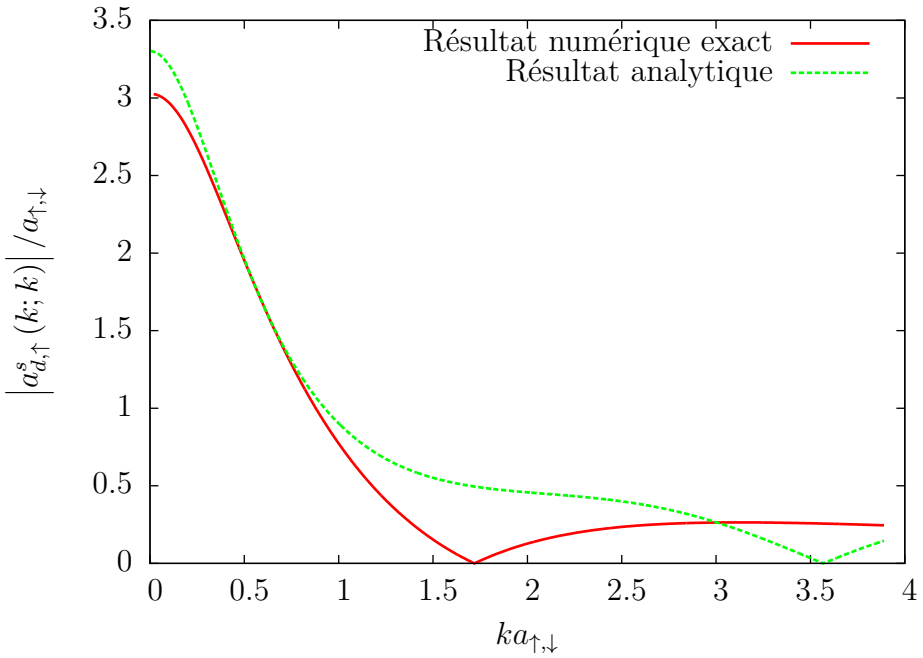


FIGURE 2.13.: Module de l'amplitude de diffusion dimère-fermion en onde s pour le couple ^{173}Yb $-^6$ Li en fonction de l'impulsion. La courbe en trait plein rouge est le résultat numérique exact alors que celle en tiret vert est le résultat analytique.

Chapitre 3

Longueur de diffusion dimère-dimère en onde s

Dans le chapitre précédent, nous avons décrit comment résoudre le problème à trois corps dans la limite de basse énergie et quand la masse de deux fermions et grande devant celle du troisième. Nous souhaitons maintenant appliquer ces techniques à l'étude de la collision de quatre fermions dont deux ont une masse grande comparée à celle des deux autres. Tout ceci, afin de calculer la longueur de diffusion dimère-dimère en onde s.

Dans la première section, nous présentons comment obtenir diagrammatiquement la longueur de diffusion exacte entre deux dimères, ainsi qu'une propriété essentielle du vertex dimère-dimère. Dans la section suivante, nous développons les équations en puissance du rapport des masses et nous relions les équations à celles obtenues dans le problème à trois corps. Nous en déduisons le comportement asymptotique de la longueur de diffusion dimère-dimère en onde s dans la limite de grand rapport des masses.

3.1. Vertex de diffusion dimère-dimère

3.1.1. Description exacte

Dans ce chapitre, nous voulons calculer la longueur de diffusion entre deux dimères. Nous avons vu au chapitre précédent que cette distance est déterminée par le vertex de diffusion entre les particules composites à impulsions et énergies cinétiques nulles. Afin de décrire celui-ci, nous devons calculer tous les diagrammes d'interaction possibles entre deux dimères composites incidents et deux dimères composites diffusés. Nous appelons ce vertex T_4 et il est représenté sur la figure (3.1). Les quatre-impulsions p_1 (respectivement p_2) décrivent les vecteurs d'ondes et énergies des dimères incidents (respectivement diffusés). $2P$ est la quatre-impulsion totale du système composé des quatre particules.

Nous devons tout d'abord casser les deux dimères pour que les quatre fermions interagissent. Le processus le plus simple est alors l'échange de deux fermions de la même espèce avant la recombinaison des quatre particules en deux nouveaux dimères. Ces deux processus sont représentés sur les figures (3.2a) et (3.2b).

Nous nous rendons compte pour chacun de ces deux échanges qu'un fermion se propage

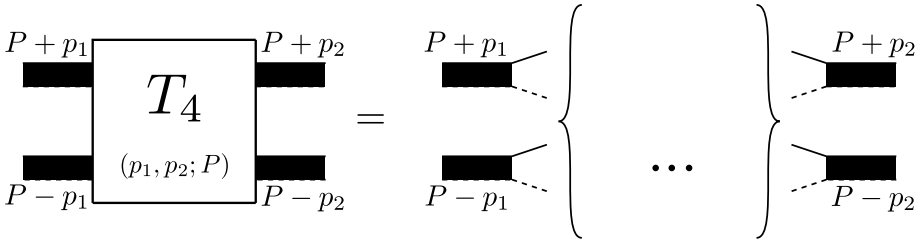


FIGURE 3.1.: Représentation diagrammatique du vertex de diffusion dimère-dimère. Il contient l'ensemble des processus d'interaction possibles entre deux fermions ↑ et deux fermions ↓ initialement et finalement appariés en deux dimères composites.



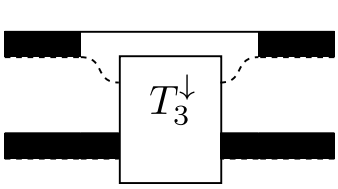
(a) Échange d'un fermion ↑ (b) Échange d'un fermion ↓

FIGURE 3.2.: Processus d'interaction le plus simple entre deux dimères. La figure 3.2a (respectivement 3.2b) décrit la séparation des deux dimères, l'échange d'un fermion ↑ (respectivement ↓) puis la recombinaison en deux dimères.

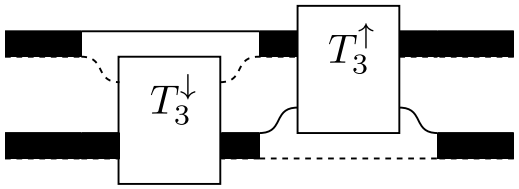
librement alors que les trois autres effectuent le processus d'interaction le plus simple entre un fermion et un dimère décrit par la figure (2.1b). Nous pouvons alors substituer le vertex de diffusion T_3 du chapitre précédent au processus d'échange des figures (3.2a) et (3.2b). Nous obtenons alors le diagramme (3.3a) et des processus plus complexes faisant intervenir plusieurs échanges entre les différentes particules. Les recombinaisons intermédiaires peuvent être ainsi décrites en utilisant le vertex T_3. Nous donnons un exemple sur la figure (3.3b).

Malheureusement, nous ne pouvons pas écrire une équation récursive comme pour le vertex de diffusion dimère-fermion décrivant tous les processus possibles entre les quatre particules à cause des diagrammes du type (3.3c). En effet, entre les deux vertex T_3, il n'y a pas de recombinaison en deux dimères. Comme notre vertex T_4 ne fait intervenir que des dimères en entrée et en sortie, la seule façon de prendre en compte ce diagramme est de l'écrire explicitement. Cela n'est pas envisageable car pour prendre en compte tous les diagrammes représentant la répétition de ce type de processus, nous avons une infinité de diagrammes à écrire explicitement.

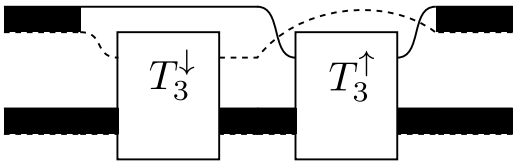
Nous suivons alors l'idée développée dans [BKK$^+$06] qui conduit à l'introduction d'un nouveau vertex. Ce vertex appelé Φ décrit les processus d'interaction entre un dimère et deux fermions libres. Nous pouvons alors écrire une équation récursive. En effet, nous pouvons répéter les processus d'échange sans recombinaison intermédiaire grâce aux deux fermions libres en entrée du vertex. Comme nous sommons sur les particules en entrée



(a) Diagramme le plus simple faisant intervenir le vertex de diffusion dimère fermion ↓.



(b) Exemple de diagramme faisant intervenir plusieurs vertex de diffusion dimère-fermion avec recombinaison.



(c) Exemple de diagramme faisant intervenir plusieurs vertex de diffusion dimère-fermion sans recombinaison.

FIGURE 3.3.: Processus d'interaction exprimés à l'aide du vertex T_3.

du vertex, nous considérons deux dimères en sortie de celui-ci. Le vertex de diffusion dimère-dimère est alors obtenu par le calcul du diagramme de la figure (3.4).

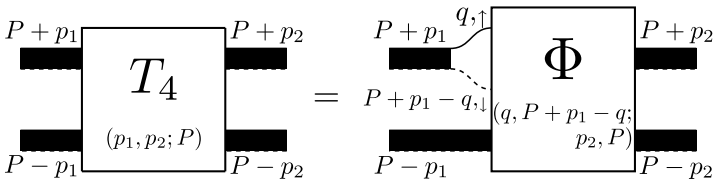


FIGURE 3.4.: Représentation diagrammatique du vertex de diffusion dimère-dimère en fonction du nouveau vertex Φ.

Le dimère incident venant de se séparer en deux fermions libres, dans le vertex Φ, ceux-ci ne doivent donc pas interagir d'abord ensemble. Nous pouvons alors écrire une équation diagrammatique représentée sur la figure (3.5), qui décrit tous les processus possibles de ce vertex.

Les deux premiers diagrammes du membre de droite décrivent le processus élémentaire, c'est-à-dire, l'échange d'un fermion ↑ ou ↓. Les deux suivants représentent, via la récursion, la répétition de ces processus jusqu'à une infinité d'échange avant recombinaison. Et les deux derniers diagrammes prennent en compte le fait que l'on puisse avoir une recombinaison intermédiaire. Le T_4 permet ainsi aux dimères reformés d'interagir à nouveau via le processus de base. Ces deux équations diagrammatiques couplées décrivent ainsi, de manière exacte, tous les processus d'interactions possibles entre deux dimères formés de particules fermioniques. En toute généralité, nous pouvons donc écrire deux

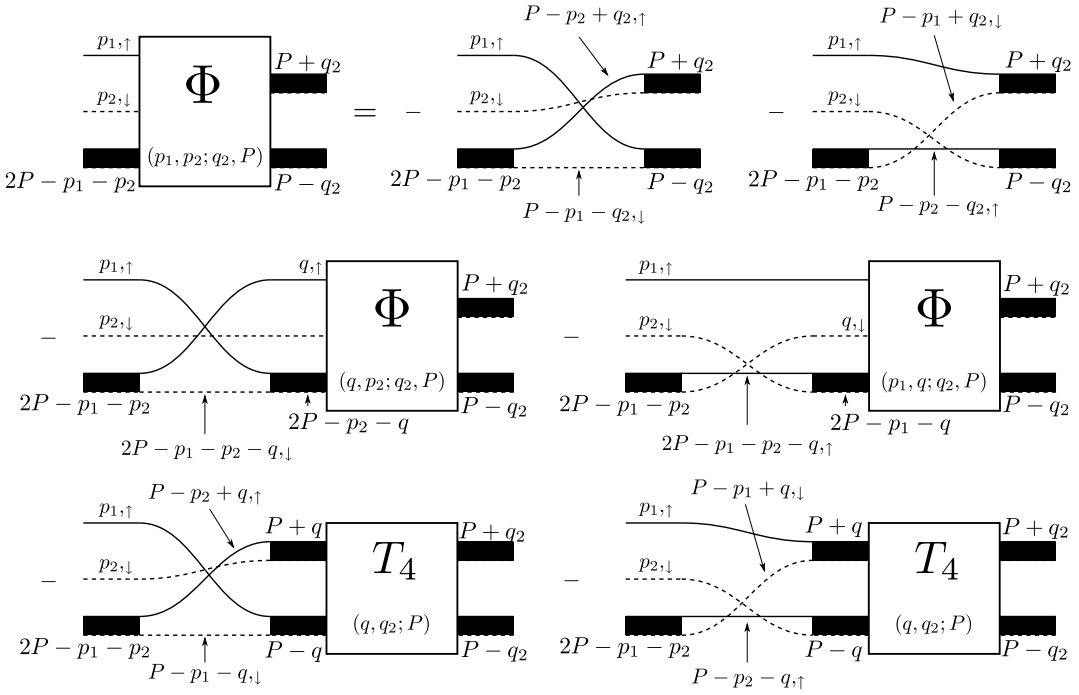


FIGURE 3.5.: Représentation diagrammatique du vertex de diffusion dimère-dimère en fonction du nouveau vertex Φ.

équations intégrales couplées. L'équation diagrammatique de la figure (3.4) s'écrit :

$$T_4\left(p_1, p_2; P\right) = \sum_q G_{0,\uparrow}\left(q\right) G_{0,\downarrow}\left(P + p_1 - q\right) \Phi\left(q, P + p_1 - q; p_2, P\right) \tag{3.1}$$

La figure (3.5) pour le nouveau vertex Φ a pour expression analytique :

$$\begin{aligned}
\Phi\left(p_1, p_2; q_2, P\right) = &- \left[G_{0,\uparrow}\left(P - p_2 + q_2\right) G_{0,\downarrow}\left(P - p_1 - q_2\right) + \left(q_2 \leftrightarrow -q_2\right)\right] \\
&- \sum_q G_{0,\uparrow}\left(q\right) G_{0,\downarrow}\left(2P - p_1 - p_2 - q\right) T_2\left(2P - p_2 - q\right) \Phi\left(q, p_2; q_2, P\right) \\
&- \sum_q G_{0,\downarrow}\left(q\right) G_{0,\uparrow}\left(2P - p_1 - p_2 - q\right) T_2\left(2P - p_1 - q\right) \Phi\left(p_1, q; q_2, P\right) \\
&- 1/2 \sum_q \left[G_{0,\uparrow}\left(P - p_2 + q\right) G_{0,\downarrow}\left(P - p_1 - q\right) + \left(q \leftrightarrow -q\right)\right] \\
&\times T_2\left(P + q\right) T_2\left(P - q\right) T_4\left(q, q_2; P\right)
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Le facteur $1/2$ est nécessaire pour éviter le double comptage des diagrammes. $G_{0,\uparrow}$ et $G_{0,\downarrow}$ sont les fonctions de Green dans le vide des fermions $\uparrow$ et $\downarrow$. T_2 est le vertex de diffusion fermion-fermion. La longueur de diffusion est alors obtenue après résolution de ces équations couplées en prenant la limite d'impulsions et d'énergies cinétiques nulles pour les variables p_1 et p_2 dans la fonction T_4. L'impulsion totale $\mathbf{P}$ doit être nulle et

l'énergie totale égale à deux fois celle de l'état lié. Nous avons alors la relation :

$$\frac{Z^2}{2} T_4 \left(0, 0; \{\mathbf{0}, -|E_b|\}\right) = g_{d,d} = \frac{2\pi a_{d,d}}{m_{d,d}} \tag{3.3}$$

où $g_{d,d}$ est la constante de couplage dimère-dimère et Z est donné dans l'équation (1.61). Nous allons maintenant étudier ces équations générales dans le but de calculer la longueur de diffusion dimère-dimère en onde s.

3.1.2. Calcul de la longueur de diffusion

Afin de calculer cette longueur, nous pouvons considérer le centre de masse immobile, c'est-à-dire $P = \{\mathbf{0}, -|E_b|\}$. D'autre part, nous avons choisi d'effectuer les sommations sur l'impulsion incidente, c'est-à-dire, la variable p_1. La quatre-impulsion des particules diffusées est donc un paramètre dans notre équation (3.1) que nous pouvons d'ores-et-déjà considérer nulle. Nous devons remarquer que si nous souhaitions obtenir l'amplitude de diffusion, comme au chapitre précédent, nous devrions garder le paramètre p_2 différent de zéro. Étant intéressés par les collisions à très basse température, nous projetons le vertex de diffusion dimère-dimère dans l'onde s. Celui-ci n'a alors plus de dépendance angulaire et a une énergie totale fixée à deux fois l'énergie de l'état lié. C'est donc une fonction de la norme de l'impulsion $\mathbf{p_1}$ et de la fréquence ω_{p_1}. Nous introduisons la fonction :

$$t_4^s \left(p_1, \omega_{p_1}\right) = \int_0^\pi \frac{d\left[\cos\left(\theta\right)\right]}{2} T_4 \left(\left\{\mathbf{p_1}, \omega_{p_1}\right\}, 0; \{\mathbf{0}, -|E_b|\}\right) \tag{3.4}$$

où θ est l'angle entre le vecteur $\mathbf{p_1}$ et un axe arbitraire. Nous pouvons alors injecter l'expression du vertex Φ (3.2) dans l'équation pour la fonction T_4 (3.1) et calculer la fonction t_4^s. En étudiant les propriétés d'analyticité du vertex Φ en fonction des fréquences ω_{p_1} et ω_{p_2}, nous pouvons réaliser les intégrations sur les fréquences dans l'opérateur intégral agissant sur le vertex Φ en fermant le contour d'intégration dans le demi-plan complexe supérieur. Nous montrons alors que ce dernier vertex doit être évalué pour des fréquences "on the shell" $\omega_{p_1} = \epsilon_\uparrow \left(\mathbf{p_1}\right)$ et $\omega_{p_2} = \epsilon_\downarrow \left(\mathbf{p_2}\right)$. Celui ci ne dépend alors plus que de trois variables, la norme des impulsions des fermions incidents $\uparrow$ et $\downarrow$ et l'angle entre les deux impulsions. Nous introduisons la fonction :

$$\phi \left(p_1, p_2, \theta\right) = \Phi \left[\overline{p_1}, \overline{p_2}; 0, \{\mathbf{0}, -|E_b|\}\right] \tag{3.5}$$

où θ est l'angle entre les vecteurs impulsions $\mathbf{p_1}$ et $\mathbf{p_2}$ et, $\overline{p_i} = \{\mathbf{p_i}, \epsilon_\sigma \left(\mathbf{p_i}\right)\}$.

Nous pouvons alors réaliser certaines intégrales sur les angles et sur les impulsions analytiquement afin de simplifier nos équations. Nous obtenons finalement un système intégral pour les fonctions t_4^s et ϕ :

$$t_4^s(p_1,\omega_{p_1}) = t_4^{\text{Born}}(p_1,\omega_{p_1}) + \iiint dq_1 dq_2 d[\cos(\alpha)]\, t_{4,\phi}(q_1,q_2,\alpha;p_1,\omega_{p_1})\,\phi(q_1,q_2,\alpha) + \iint dq_1 d\omega_{q_1} t_{4,t_4}(q_1,\omega_{q_1};p_1,\omega_{p_1})\, t_4^s(q_1,\omega_{q_1}) \quad (3.6)$$

$$\phi(p_1,p_2,\theta) = \phi^{\text{Born}}(p_1,p_2) + \iint dq_1 d[\cos(\alpha)]\,\phi_{\phi_1}(q_1,\alpha;p_1,p_2,\theta)\,\phi(q_1,p_2,\alpha) + \iint dq_2 d[\cos(\eta)]\,\phi_{\phi_2}(q_2,\eta;p_1,p_2,\theta)\,\phi(p_1,q_2,\eta) + \iint dq_1 d\omega_{q_1}\phi_{t_4}(q_1,\omega_{q_1};p_1,p_2,\theta)\, t_4^s(q_1,\omega_{q_1}) \quad (3.7)$$

où les noyaux de ces opérateurs intégraux sont donnés dans l'annexe (A.3). L'intégration sur les fréquences doit être effectuée sur l'axe imaginaire. Nous pouvons analyser les singularités dans le plan complexe afin de déformer le contour d'intégration et ramener cette intégrale sur l'axe réel. Aucune singularité n'est rencontrée et toutes les quantités sont alors réelles. La résolution de ce système permet d'obtenir la longueur de diffusion dimère-dimère en onde s exacte, en prenant la limite d'impulsion et de fréquence nulle dans la fonction t_4^s. Nous allons maintenant nous intéresser au calcul de l'expression analytique dans la limite où le rapport des masses entre les fermions $\uparrow$ et $\downarrow$ devient grand. Nous devons remarquer dans ce problème à quatre particules qu'il est symétrique par échange des fermions d'espèce différente, nous avons donc une seule limite à étudier. Nous allons présenter les développements analytiques pouvant être obtenus dans cette approche et les comparer à la résolution numérique exacte des équations (3.6) et (3.7).

3.1.3. Règle de somme

Dans le problème à trois fermions, nous avons vu qu'il existe une règle de somme pour l'amplitude de diffusion (2.19). Celle-ci est obtenue en analysant le comportement de l'amplitude de diffusion à grande impulsion. Nous avons vu que cette condition est une conséquence du principe de Pauli, interdisant à deux fermions de même espèce de se trouver au même endroit. Nous allons voir qu'il existe une relation similaire dans ce problème à quatre particules.

Nous utilisons la même idée que précédemment en développant l'équation du vertex Φ (3.2) à grandes impulsions $\mathbf{p_1}$ et $\mathbf{p_2}$. En prenant en compte les fréquences "on the shell" pour ces quatre vecteurs et en considérant le quatre vecteur q_2 nul, nous obtenons le développement asymptotique :

$$\Phi\left(\bar{p_1},\bar{p_2};0,P\right)\sim -G_{0,\downarrow}\left(-\bar{p_1}\right)G_{0,\downarrow}\left(-\bar{p_2}\right)\left[2+\sum_q T_2\left(P+q\right)T_2\left(P-q\right)T_4\left(q,0;P\right)\right]$$
$$-G_{0,\uparrow}\left(-\bar{p_1}-\bar{p_2}\right)T_2\left(-\bar{p_1}\right)\sum_{\mathbf{q}}\Phi\left(\bar{p_1},\bar{q};0,P\right)-G_{0,\downarrow}\left(-\bar{p_1}-\bar{p_2}\right)T_2\left(-\bar{p_2}\right)\sum_{\mathbf{q}}\Phi\left(\bar{q},\bar{p_2};0,P\right) \tag{3.8}$$

Nous obtenons le comportement dominant qui est le produit des deux fonctions de Green libres, mais également une contradiction. Dans les termes intégraux agissant sur le vertex Φ, si nous réinjectons le comportement asymptotique, par exemple dans la sommation sur la première variable, nous voyons immédiatement que ceux-ci sont divergents. En effet la fonction de Green se comporte comme l'inverse d'une impulsion au carré, et en sommant sur cette impulsion, l'intégrale est divergente à trois dimensions. Nous en déduisons que le terme entre crochets dans le premier terme du membre de droite de l'équation (3.8) doit être égal à zéro. La règle de somme s'écrit alors pour quatre fermions :

$$\sum_q T_2\left(P+q\right)T_2\left(P-q\right)T_4\left(q,0;P\right)+2=0 \tag{3.9}$$

Nous pouvons penser que cette condition est ici aussi une conséquence du principe de Pauli, même si nous n'avons pas mené d'investigation plus détaillée. Ici, le problème est plus compliqué que pour trois particules. En effet, il intervient dans cette expression (3.9) une sommation sur la quatre impulsion, et donc la fréquence, qui rend le lien avec la fonction d'onde plus compliqué à établir. Nous proposons une définition dans la section (3.2.3). Dans la prochaine section, nous allons développer nos équations dans la limite de grand rapport des masses afin d'obtenir une expression analytique pour le comportement asymptotique de la longueur de diffusion.

3.2. Longueur de diffusion élastique en onde s

Dans cette partie, nous simplifions les équations (3.6) et (3.7) dans la limite où le rapport des masses est grand. Puis, nous proposons une solution pour le comportement asymptotique de la longueur de diffusion dimère-dimère dans cette limite. Finalement, nous résolvons les équations couplées afin de comparer le résultat exact à ce développement analytique.

3.2.1. Simplification à grand rapport des masses

Comme ce problème est symétrique par échange des espèces, nous étudions seulement la limite où les fermions $\downarrow$ sont beaucoup plus légers que les fermions $\uparrow$. Nous conservons le même petit paramètre que pour le problème à trois fermions $\epsilon = \frac{m_\uparrow}{m_\downarrow}$ et nous développons les noyaux des opérateurs intégraux, des équations (3.6) et (3.7), en puissance du

paramètre.

La plupart des noyaux ne rendent pas les intégrales singulières, exceptés ceux agissant sur le vertex de diffusion dimère-dimère. En effet, dans l'équation (3.2), nous pouvons voir explicitement le produit de deux termes en $T_2\left(P \pm q\right)$ qui posent problème à grand rapport des masses. Comme nous l'avons vu précédemment, ce vertex de diffusion fermion-fermion, T_2, se comporte comme un propagateur bosonique (1.62) à faible quatre-impulsion q. Nous pouvons écrire $T_2\left(P \pm q\right) \sim \left[\pm\omega_q - \epsilon_d\left(\mathbf{q}\right) + i0^+\right]^{-1}$. Nous comprenons qu'à la limite de masse infinie, l'énergie cinétique du dimère vaut essentiellement zéro et le produit de ces deux fonctions rend la sommation sur les fréquences ω_q divergente. Nous effectuons alors le changement de variable $\omega_q = z_q\epsilon_d\left(\mathbf{q}\right)$ dans ces opérateurs intégraux. Le développement en puissance de notre petit paramètre conduit alors, au premier ordre, à évaluer le vertex de diffusion dimère-dimère, T_4, apparaissant dans l'intégrale pour une fréquence ω_q nulle. La sommation sur la variable z_q peut être effectuée analytiquement. Ce vertex ne dépendant plus que de l'impulsion dans nos intégrales, nous pouvons nous restreindre à l'étude du vertex $t_4^s\left(p_1, \omega_{p_1} = 0\right)$, ce qui conduit à de nouvelles simplifications dans les équations intégrales (3.6) et (3.7). Après adimensionnement, nous obtenons à l'ordre le plus bas dans le développement :

$$\begin{aligned}\epsilon\bar{t}_4^s\left(p_1\right) = {} & \frac{8}{4+p_1^2} + \frac{1}{\pi p_1}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dq_1}{q_1}\log\left[4+\left(p_1-q_1\right)^2\right]\bar{t}_4^s\left(q_1\right) \\ -\frac{8}{\pi^2 p_1}\int_0^{\infty}\frac{dq_1 q_1^2\left(1+\sqrt{2+q_1^2}\right)}{\left(1+q_1^2\right)^2}\int_0^{\infty}dq_2 q_2\log\left[\frac{1+\left(p_1+q_2\right)^2}{1+\left(p_1-q_2\right)^2}\right]\int_{-1}^{1}d\left[\cos\left(\alpha\right)\right]\phi\left(q_1,q_2,\alpha\right)\end{aligned} \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}\phi\left(p_1,p_2,\theta\right) = {} & \frac{1}{\left(1+p_1^2\right)}\left\{\frac{1}{\left(1+p_2^2\right)} + \frac{1}{8\pi p_2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dq_1}{q_1}\log\left[1+\left(q_1-p_2\right)^2\right]\bar{t}_4^s\left(q_1\right)\right\} \\ & - \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{dq_1 q_1^2\left(1+\sqrt{2+q_1^2}\right)}{\left(2+q_1^2+p_1^2\right)\left(1+q_1^2\right)}\int_{-1}^{1}d\left[\cos\left(\alpha\right)\right]\phi\left(q_1,p_2,\alpha\right) \\ & - \frac{\left(1+\sqrt{2+p_1^2}\right)}{\pi\left(1+p_1^2\right)}\int_0^{\infty}dq_2 q_2^2\int_{-1}^{1}d\left[\cos\left(\eta\right)\right]\frac{\phi\left(p_1,q_2,\eta\right)}{\sqrt{\Delta_+\Delta_-}}\end{aligned} \tag{3.11}$$

où $\bar{t}_4^s\left(k\right) = t_4^s\left(k,0\right)/\epsilon$ et $\Delta_\pm = 2 + 2p_1^2 + q_2^2 + p_2^2 + 2p_1q_2\cos\left(\eta\right) + 2p_1p_2\cos\left(\theta\right) + 2q_2p_2\cos\left(\theta\pm\eta\right)$. La longueur de diffusion est alors obtenue en développant l'équation (3.3). Ce qui conduit à :

$$\frac{a_{d,d}}{a_{\uparrow,\downarrow}} = \frac{\bar{t}_4^s\left(0\right)}{4} \tag{3.12}$$

Dans ce développement, nous nous sommes limités à l'ordre le plus bas pour chaque terme intégral. Nous avons vu au chapitre précédent qu'un tel développement contient

l'essentiel des propriétés de diffusion à basse énergie dans le cas limite de grand rapport des masses. Il est à noter aussi, que nous négligeons certains détails à grande impulsion qui ne jouent un rôle que lorsque les dimères sont proches l'un de l'autre. Mais ces dimères ont également une probabilité exponentiellement faible en fonction de la racine du rapport des masses de s'approcher à des distances de l'ordre de la longueur de diffusion fermion-fermion. Cela peut être vu dans l'approximation de Born-Oppenheimer [MKSP08]. Les détails à courte distance ainsi que la condition de non-recouvrement des dimères n'ont alors aucune importance pour obtenir le comportement asymptotique et donc les caractéristiques de la diffusion. Nous pouvons être convaincus de cette approximation en résolvant numériquement les équations couplées (3.10) et (3.11) et en comparant cette approche au résultat exact donné par la résolution des équations (3.6) et (3.7). Nous avons représenté les résultats sur la figure (3.6).

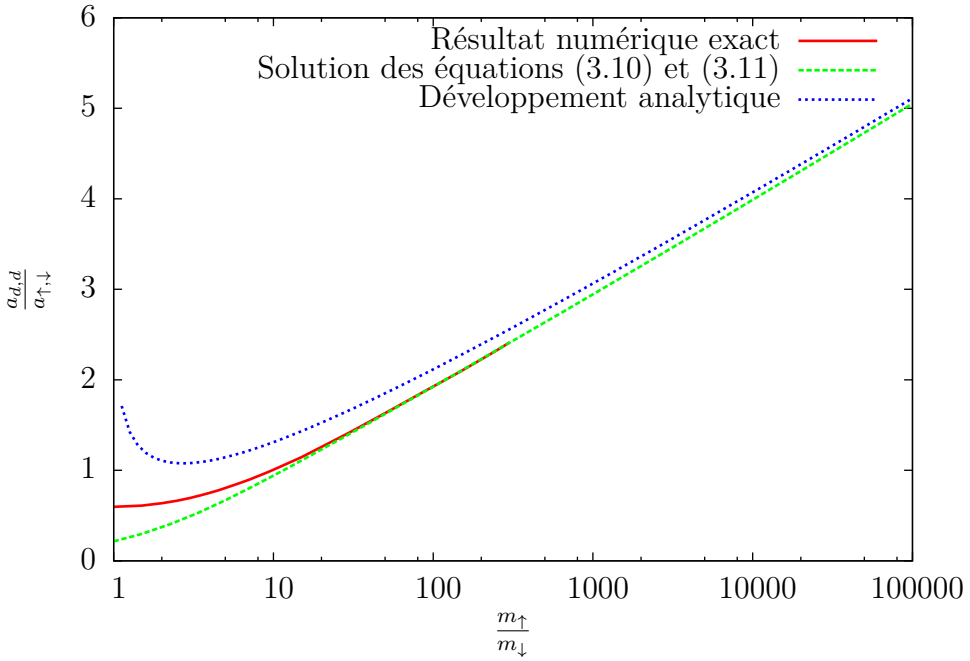


FIGURE 3.6.: Longueur de diffusion dimère-dimère en onde s en fonction du rapport des masses. En rouge est représenté le résultat numérique exact, alors que les tirets verts décrivent la solution des équations développées (3.10) et (3.11).

Tout d'abord, nous devons dire que la résolution numérique du problème exact est difficile à réaliser pour de grand rapport des masses. Nous constatons pour des rapports des masses de l'ordre de 500 des problèmes de précision qui nous donne peu confiance en ces résultats. Au contraire, pour des valeurs inférieures, la précision obtenue est excellente. Nous estimons l'erreur inférieure à 2%. Pour des masses égales entre les différentes espèces fermioniques, nous retrouvons la valeur déjà connu $a_{d,d} \sim 0.6 a_{\uparrow,\downarrow}$ [PSS04, BKK$^+$06, LG06]. D'autre part, nous constatons que pour un rapport des masses seulement de l'ordre de la dizaine, notre approximation donnée par les équations (3.10) et (3.11) est déjà en excellent accord avec les résultats numériques exacts. L'écart est inférieur à la précision numérique. Cette approche décrit correctement le comportement

asymptotique dans la limite de grand rapport des masses.

Dans la règle de somme (3.9), nous remarquons qu'il intervient le même produit des vertex T_2 mentionné précédemment qui pose le même problème. Nous utilisons la même idée afin d'arriver à la conclusion que pour cette règle de somme aussi, la fréquence du vertex T_4 est essentiellement nulle dans la limite de masse infinie. Nous obtenons alors une nouvelle condition pour la fonction $\bar{t}_4^s(k)$:

$$\int_0^\infty dq \bar{t}_4^s(q) = 2\pi \tag{3.13}$$

Nous allons maintenant voir comment obtenir une expression analytique de la longueur de diffusion en onde s dans ce cas limite et nous verrons la similitude avec le problème à trois fermions.

3.2.2. Résolution des équations dans la limite de masse lourde

Nous savons que la longueur de diffusion en onde s diverge à grand rapport des masses, et que celle-ci correspond à la valeur, à un facteur près, de la fonction $\bar{t}_4^s$ à impulsion nulle, d'après l'équation (3.12). D'autre part, nous avons une relation intégrale (3.13) stipulant que la fonction $\bar{t}_4^s$ est normalisée. Nous en déduisons, comme dans le problème à trois particules, que cette fonction $\bar{t}_4^s$ sera de plus en plus piquée à l'origine quand le rapport des masses devient grand. Nous pouvons alors développer les logarithmes en facteur de $\bar{t}_4^s(q_1)$, intervenant dans les équations (3.10) et (3.11) en puissance de l'impulsion $q_1 \to 0$. Les intégrales dépendant de la fonction $\bar{t}_4^s$ sont alors celles de la règle de somme développée (3.13). Dans les deux équations (3.10) et (3.11), nous constatons alors que ces contributions compensent exactement les termes de Born. Dans la limite de masse infinie, les équations (3.10) et (3.11) se réécrivent :

$$\epsilon \bar{t}_4^s(p_1) = -\frac{8}{\pi^2 p_1} \int_0^\infty \frac{dq_1 q_1^2 \left(1+\sqrt{2+q_1^2}\right)}{\left(1+q_1^2\right)^2} \int_0^\infty dq_2 q_2 \log\left[\frac{1+(p_1+q_2)^2}{1+(p_1-q_2)^2}\right] \times \int_{-1}^1 d\left[\cos(\alpha)\right] \phi(q_1, q_2, \alpha) \tag{3.14}$$

$$\phi(p_1, p_2, \theta) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dq_1 q_1^2 \left(1+\sqrt{2+q_1^2}\right)}{\left(2+q_1^2+p_1^2\right)\left(1+q_1^2\right)} \int_{-1}^1 d\left[\cos(\alpha)\right] \phi(q_1, p_2, \alpha) - \frac{\left(1+\sqrt{2+p_1^2}\right)}{\pi\left(1+p_1^2\right)} \int_0^\infty dq_2 q_2^2 \int_{-1}^1 d\left[\cos(\eta)\right] \frac{\phi(p_1, q_2, \eta)}{\sqrt{\Delta_+ \Delta_-}} \tag{3.15}$$

Dans l'équation (3.15), nous constatons que si le noyau n'a pas de valeur propre égale à 1, la solution de cette équation est simplement $\phi = 0$. Nous pouvons vérifier numériquement que cette proposition est justifiée. En revenant à l'équation (3.14), le membre

de droite est égal à zéro et le membre de gauche également dans la limite où $\epsilon = 0$. Malheureusement, nous ne pouvons rien obtenir sur le comportement de la longueur de diffusion. Nous pouvons quand même comprendre que dans la limite de grande masse, la fonction $\bar{t}_4^s$ est fortement piquée à l'origine et la fonction ϕ tend vers zéro. Pour obtenir plus d'information, nous devons prendre en compte la largeur finie de la fonction $\bar{t}_4^s$ au lieu de la considérer comme un delta de Dirac. Nous réécrivons le terme "source" de l'équation pour ϕ (3.11) sous la forme $1/\left(1+p_1^2\right) S\left(p_2\right)$ avec :

$$S\left(p_2\right) = \frac{1}{\left(1+p_2^2\right)} + \frac{1}{8\pi p_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{q_1} \log\left[1 + \left(q_1 - p_2\right)^2\right] \bar{t}_4^s\left(q_1\right) \tag{3.16}$$

Nous avons vu que cette fonction s'annule dans la limite où la fonction $\bar{t}_4^s$ est un delta de Dirac. Nous pouvons étudier la fonction (3.16) dans la limite où l'impulsion est grande. Nous développons le logarithme, et en utilisant la règle de somme, nous trouvons alors que la fonction S vaut zéro dans cette limite. Pour être plus précis, la fonction inconnue $\bar{t}_4^s\left(q\right)$ intervenant dans l'intégrale à une largeur, que nous notons q_0, qui diminue quand le rapport des masses augmente. Quand l'impulsion p_2 de la fonction S est bien plus grande que q_0, nous pouvons également développer le logarithme et utiliser la règle de somme pour montrer que la fonction S vaut zéro. Nous en déduisons que plus le rapport des masses augmente, plus la largeur de la fonction S diminue, et qu'elle est centrée autour de $p_2 = 0$. Cette fonction a une autre propriété intéressante qui est :

$$\int_0^{\infty} dq q^2 S\left(q\right) = 0 \tag{3.17}$$

Cette propriété exacte est obtenue en utilisant la règle de somme (3.13). Nous supposons alors que la fonction ϕ se factorise sous la forme $\phi\left(p_1, p_2, \alpha\right) = F\left(p_1\right) S\left(p_2\right)$. En injectant cette expression dans l'équation pour ϕ, nous utilisons l'intégrale (3.17) dans le dernier terme du membre de droite de l'équation (3.11). Nous obtenons alors une équation intégrale pour la fonction F :

$$F\left(p_1\right) = \frac{1}{1+p_1^2} - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1 q_1^2 \left(1 + \sqrt{2+q_1^2}\right)}{\left(2+q_1^2+p_1^2\right)\left(1+q_1^2\right)} F\left(q_1\right) \tag{3.18}$$

dont la solution non triviale est :

$$F\left(p_1\right) = \frac{2}{\left(1+p_1^2\right)\left(1+\sqrt{2+p_1^2}\right)} \tag{3.19}$$

La fonction ainsi décrite, $\phi(p_1, p_2, \alpha) = F(p_1)S(p_2)$, est donc bien solution de l'équation (3.11). Nous pouvons alors l'injecter dans l'équation (3.10), la fonction $\phi\left(p_1, p_2, \theta\right)$ ayant une largeur en fonction de p_2 qui diminue quand le rapport des masses augmente, nous

développons le logarithme dans le dernier terme du membre de droite. L'intégrale est alors réalisée en utilisant la relation (3.17). Nous en déduisons, dans la limite de grand rapport des masses, que le système (3.10) et (3.11) devient :

$$\epsilon \bar{t}_4^s(p_1) = \frac{8}{4+p_1^2} + \frac{1}{\pi p_1}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{q_1} \log\left[4+(p_1-q_1)^2\right] \bar{t}_4^s(q_1) \tag{3.20}$$

$$\phi(p_1,p_2,\theta) = \frac{2S(p_2)}{(1+p_1^2)\left(1+\sqrt{2+p_1^2}\right)} \tag{3.21}$$

où la fonction S est obtenue en injectant la solution de (3.20) dans l'équation (3.16). Afin d'obtenir la longueur de diffusion dimère-dimère, nous devons simplement résoudre l'équation intégrale (3.20) et utiliser la relation (3.12). C'est un problème que nous avons déjà résolu. En effet, en effectuant le changement de fonction $\bar{t}_4^s(p_1) = 2g_0(2p_1)$, nous retrouvons l'équation (2.35). Nous avons ici pris la limite d'énergie nulle, c'est-à-dire où l'impulsion p_2 est égale à zéro. En utilisant les résultats du chapitre précédent, nous en déduisons une expression analytique de la longueur de diffusion à grand rapport des masses :

$$\frac{a_{d,d}}{a_{\uparrow,\downarrow}} = \left\{\log\left(\frac{m_\uparrow}{m_\downarrow}\right) - \log\left[\log\left(\frac{m_\uparrow}{m_\downarrow}\right)\right] + 2\gamma\right\}/2 \tag{3.22}$$

Dans la prochaine section, nous allons discuter et comparer les résultats obtenus.

3.2.3. Discussion des résultats

Règle de somme

Nous commençons par vérifier la règle de somme utile à notre calcul. Nous pouvons résoudre les équations couplées exactes (3.6) et (3.7) numériquement et calculer le terme intégral de l'équation (3.9). Nous pouvons également résoudre les équations couplées développées (3.10) et (3.11) et calculer l'intégrale de l'équation (3.13). Pour différents rapports des masses, nous représentons sur la figure (3.7) les deux quantités intégrales que nous avons normalisées afin que le résultat soit égal à un.

Pour le résultat exact, nous constatons bien que la règle de somme est vérifiée quel que soit le rapport des masses, à l'erreur numérique près. Quant aux équations développées, la règle de somme est vérifiée dès que le rapport des masses est de l'ordre de la dizaine. Nous pouvons également être convaincu que notre résolution numérique des équations exactes est suffisamment précise pour un rapport des masses inférieur à 300.

Vérification de l'hypothèse de découplage des variables $\phi(p_1,p_2,\alpha) = F(p_1)S(p_2)$

Dans le but de valider notre hypothèse de découplage des variables p_1, p_2 et α pour le vertex ϕ à grand rapport des masses, nous représentons $\phi(p_1,p_2,\alpha)/F(p_1)$ en fonction de p_2. Nous calculons ce vertex numériquement pour des masses égales entre les fermions et

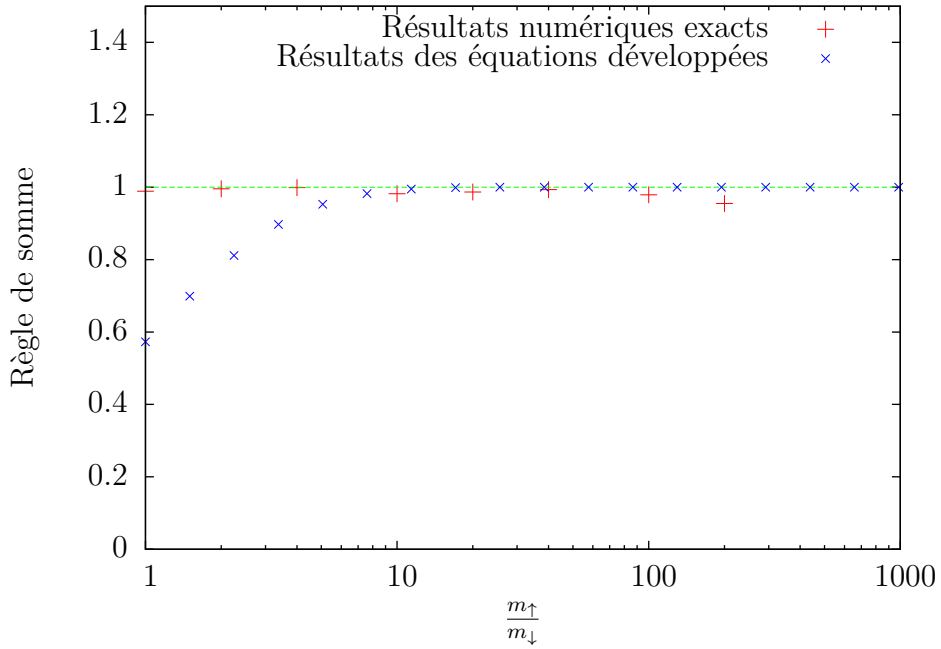


FIGURE 3.7.: Règle de somme

représentons les données brutes sur la figure (3.8), c'est-à-dire, pour différentes valeurs de p_1 et α.

Nous constatons clairement que la fonction obtenue ne dépend pas seulement de p_2 mais également de p_1 et de α. Nous pouvons tracer les mêmes quantités mais pour des rapports de masse bien plus grand que un. Sur la figure (3.9), nous avons représenté cette même quantité pour un rapport des masses de 100 et de 200.

Nous pouvons être convaincu que les variables sont bien découplées à grand rapport des masses car cette fonction dépend seulement de la variable p_2. Nous mesurons une dispersion de l'ordre de 3 pourcents ce qui est raisonnable pour un rapport des masses fini. Nous pouvons également constater que la largeur à demi hauteur diminue quand le rapport des masses augmente. Nous pouvons donc être confiant dans notre approximation affirmant que la fonction $S(p_2)$ devient de plus en plus piquée à l'origine quand le rapport des masses augmente et que $\phi(p_1, p_2, \alpha) = F(p_1)S(p_2)$

Approximation de Pieri et Strinati

Tout d'abord, nous devons remarquer la disparition du vertex ϕ dans l'équation (3.20). Cette équation peut être obtenue directement, en développant en puissance du rapport des masses, l'équation pour le vertex T_4 dans l'approximation faite par Pieri et Strinati [PS00]. Celle-ci consiste à considérer l'interaction entre dimères composites sans possibilité de dissociation décrite par le vertex ϕ. Cela revient à répéter la diffusion entre deux dimères composites. Cette approximation donne une longueur de diffusion dimère-dimère $0.75a_{\uparrow,\downarrow}$ au lieu de $0.6a_{\uparrow,\downarrow}$, pour des masses égales. Quand le rapport des masses augmente, cette approximation donne de très bons résultats et décrit correctement le comportement asymptotique de la longueur de diffusion.

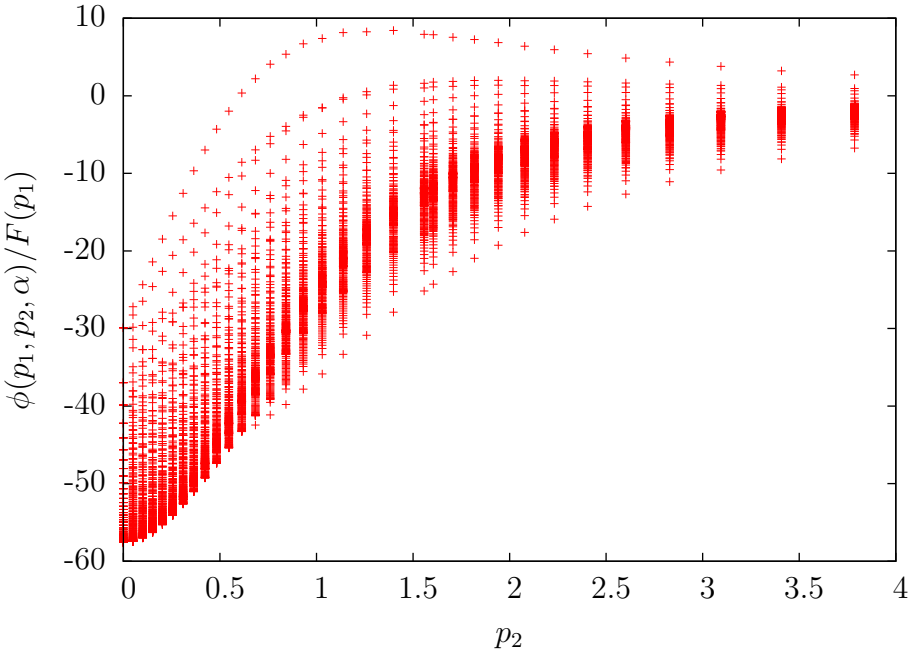


FIGURE 3.8.: $\Phi/F\left(p_1\right)$ en fonction de p_2. Les données brutes du vertex ϕ sont obtenues par résolution des équations exactes (3.6) et (3.7) pour des masses égales.

Comparaison numérique des résultats

Nous pouvons alors comparer le résultat analytique (3.22), au résultat exact obtenu en résolvant les équations (3.6) et (3.7). Ceci est représenté sur la figure (3.10) où le comportement asymptotique est bien donné par notre développement analytique (3.22).

Lien avec le problème à trois corps

Nous revenons à l'équation (3.18) qui a une interprétation physique intéressante. Comme nous l'avons vu le vertex Φ décrit la diffusion de deux fermions libres avec un dimère. Dans la limite de grande masse, il est raisonnable de considérer que le fermion lourd libre ne joue aucun rôle. Le vertex est alors caractérisé par la diffusion d'un fermion léger sur un dimère dont nous avons proposé une solution analytique à la section (2.2.1). Cependant, il y a une différence avec le cas précédent. En effet, pour $T_3^{\uparrow}$, l'énergie totale est égale à l'énergie de l'état lié alors que pour le vertex Φ, elle vaut deux fois cette énergie car nous considérons la diffusion avec deux dimères en sortie. En remettant, les dimensions dans notre équation (3.18), nous pouvons remonter à cette énergie totale qui est représentée par les facteurs 2 du terme intégral. Si nous avions seulement un problème dimère-fermion, nous devrions remplacer ceux ci par 1 et la solution de cette équation est alors : $\tilde{F}\left(p_1\right) = 2a_3^s\left(p_1; 0\right) / \left[a_{\uparrow,\downarrow}\left(1+\sqrt{1+p_1^2}\right)\right]$ où $a_3^s\left(p_1; 0\right) = f\left(p_1\right)$ est la solution décrite à la section (2.2.1). Nous pouvons remettre les dimensions et nous obtenons que cette fonction $\tilde{F}$ vaut simplement la projection en onde s du vertex $T_3^{\uparrow}\left(\mathbf{p_1}, \mathbf{0}; \{\mathbf{0}, -|E_b|\}\right)$. Nous comprenons alors que la solution de la fonction F intervenant dans le problème à quatre corps est obtenue en prenant l'énergie totale égale à deux fois l'énergie de l'état lié, c'est à dire, en remplaçant le 2 de la racine par 1.

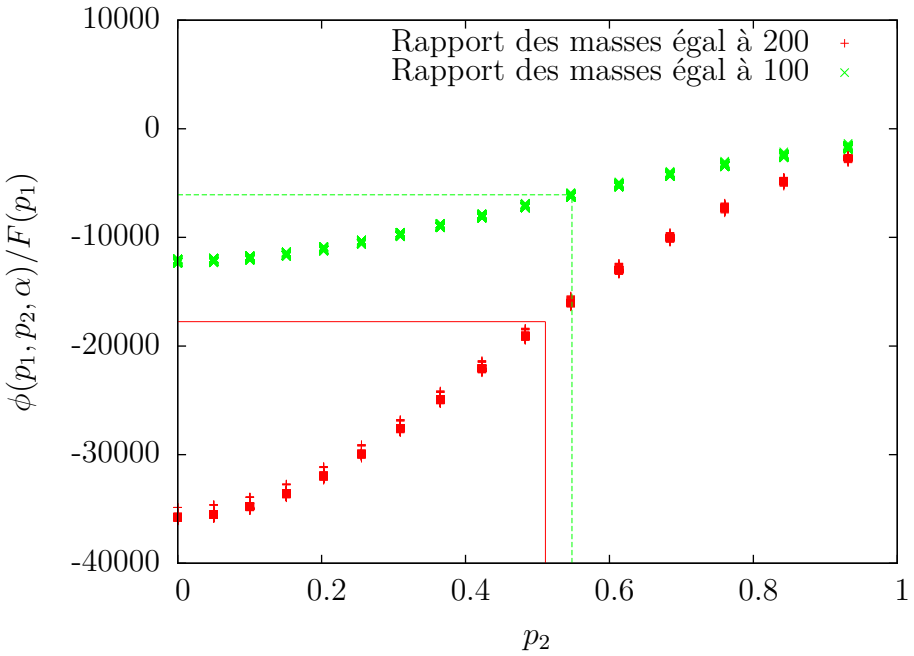


FIGURE 3.9.: $\Phi/F\,(p_1)$ en fonction de p_2. Les données brutes du vertex ϕ sont obtenues par résolution des équations exactes. Elles sont représentées en vert pour un rapport des masses de 100 et en rouge pour un rapport des masses de 200.

Amplitude de diffusion dimère-dimère et principe de Pauli

Dans cette section nous allons voir comment définir l'amplitude de diffusion entre deux dimères composites. Sur la figure (3.11), nous représentons le système que nous avons étudié où trois vecteurs définissent les positions des particules.

$\mathbf{r_1}$ et $\mathbf{r_2}$ sont les vecteurs positions définissant la distance entre les particules $\uparrow$ et $\downarrow$ formant l'état lié. Le vecteur $\mathbf{r}$ décrit la distance entre les deux dimères composites. En suivant [STM57], nous définissons la fonction dimère-dimère comme la limite de la fonction d'onde des quatre particules où les distances r_1 et r_2 tendent vers zéro. Comme les fonctions d'onde des états liés se comportent comme l'inverse de la distance entre les particules $\uparrow$ et $\downarrow$, $\phi_{\mathrm{BS}}(\mathbf{r_1}) \sim_{r_1 \to 0} 1/r_1$, la fonction d'onde dimère-dimère est définie comme :

$$\phi_{d,d}(\mathbf{r}) = \lim_{r_1 \to 0, r_2 \to 0} r_1 r_2 \psi\left(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}; \mathbf{r}\right) \tag{3.23}$$

Le principe de Pauli, interdisant à deux fermions de la même espèce de se trouver au même endroit, on déduit qu'à la limite de distance r nulle, la fonction d'onde s'annule aussi. Soit la condition :

$$\lim_{r \to 0} \phi_{d,d}\left(\mathbf{r}\right) = 0 \tag{3.24}$$

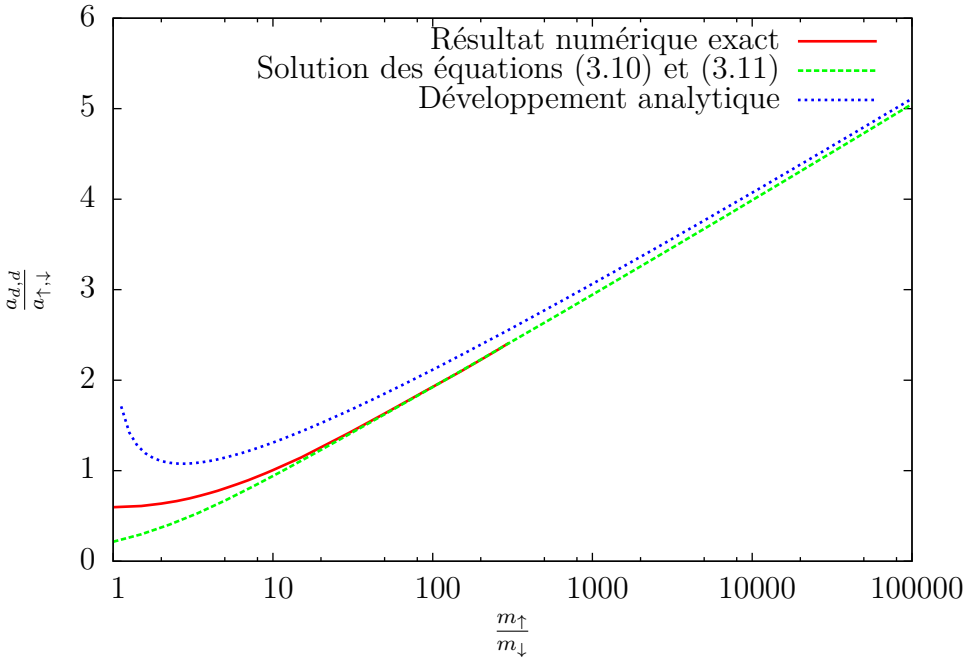


FIGURE 3.10.: Longueur de diffusion dimère-dimère en onde s en fonction du rapport des masses. En rouge est représenté le résultat numérique exact. Le développement analytique (3.22) est tracé en tirets courts bleus.

En utilisant alors le lien entre la fonction d'onde dans l'espace des impulsions et l'amplitude de diffusion (1.8), cette condition se traduit sur l'amplitude de diffusion comme :

$$\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi a_{d,d}\left(\mathbf{q};\mathbf{0}\right)}{\mathbf{q}^2 - i0^+} = 1 \tag{3.25}$$

où nous avons considéré le vecteur de l'onde diffusée nul, car nous ne savons pas comment traiter la fréquence associée à ce vecteur. On constate clairement la similitude avec la règle de somme (3.9). Par identification, nous proposons alors de définir l'amplitude de diffusion dimère-dimère, à énergie diffusée nulle, comme :

$$\frac{a_{d,d}\left(\mathbf{k};\mathbf{0}\right)}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{0}^2 - i0^+} = -\frac{1}{8\pi} \sum_{\omega_k} T_2\left(P + k\right) T_2\left(P - k\right) T_4\left(k, 0; P\right) \tag{3.26}$$

Pour être plus convaincant, nous calculons la valeur de cette fonction quand le vecteur d'onde s'annule. On constate alors que pour les mêmes raisons que précédemment, le produit des deux vertex T_2 donne une contribution divergente quand la fréquence ω_k s'annule. En faisant le même changement de variable que précédemment, il reste à évaluer le vertex T_4 à fréquence nulle. On peut alors réaliser l'intégration sur les fréquences, ce qui conduit à :

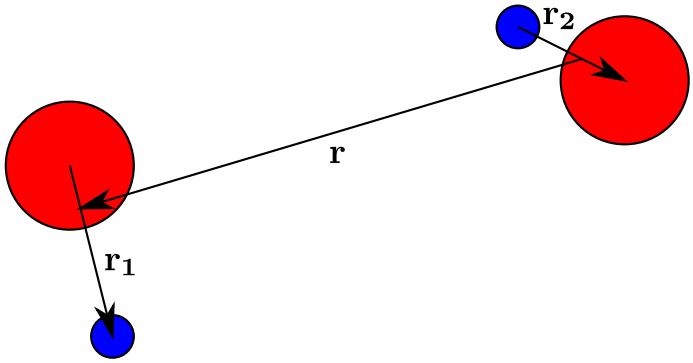


FIGURE 3.11.: Définition des positions relatives dans le problème à 4 fermions.

$$a_{d,d}\left(\mathbf{0};\mathbf{0}\right) = \frac{m_d Z^2}{8\pi} T_4\left(0,0;\{\mathbf{0},-|E_b|\}\right) \tag{3.27}$$

où l'on obtient la bonne longueur de diffusion dimère-dimère donnée par la relation (3.3).

Conclusion et perspectives

Dans la première partie de cette thèse, nous nous sommes intéressés aux propriétés de collisions entre fermions à basse température, plus précisément aux problèmes à 3 et 4 corps à basse énergie et dans le vide. Nous avons vu que dans ces conditions, deux fermions identiques n'interagissent pas. De plus, dans la limite BEC, deux fermions d'espèce différente s'apparient en un dimère bosonique très fortement lié. Les interactions dans un gaz composé de deux espèces sont alors caractérisées par les longueurs de diffusion en onde-s dimère-fermion ($a_{d,\uparrow}$) et dimère-dimère ($a_{d,d}$).

Nous avons d'abord décrit d'une manière exacte le calcul diagrammatique du vertex de diffusion dimère-fermion et son lien avec l'amplitude de diffusion. Puis nous avons soigneusement simplifié le problème dans les limites où les masses sont très différentes. Dans la limite où deux fermions identiques sont très légers comparé à un fermion très lourd, nous avons vu que ce dernier est essentiellement immobile. Un fermion léger formant un état lié avec celui-ci ne joue alors aucun rôle et la diffusion entre le dimère et le fermion léger restant est bien décrite par la diffusion de celui-ci avec le fermion lourd.

Quand le trio est constitué par deux fermions lourds et un fermion léger, le problème est plus compliqué mais l'essentiel de la physique est alors bien décrit par l'approximation de Born-Oppenheimer. Nous avons justifié une telle approximation et trouvé une solution approchée de l'équation de Schrödinger. Nous avons pu ainsi obtenir le comportement asymptotique de la longueur de diffusion en onde-s en fonction du rapport des masses. Nous avons obtenu une correction en log(log) non négligeable devant le comportement logarithmique dominant. Nous avons également calculé les corrections à plus haute énergie via un développement analytique de l'amplitude de diffusion en onde-s. Nous avons clairement mis en évidence que pour un grand rapport des masses, le module de l'amplitude de diffusion s'annule pour des valeurs discrètes de l'énergie. Ce phénomène n'existe pas pour un mélange de fermions de masses identiques.

Nous avons également développé les équations diagrammatiques du vertex dimère-dimère dans le but de calculer la longueur de diffusion dimère-dimère. En utilisant les mêmes idées que pour le problème à 3 corps, nous avons obtenu un développement analytique du comportement asymptotique de la longueur de diffusion dimère-dimère en onde-s en fonction du rapport des masses. Nous avons montré que le résultat est la moitié de la longueur de diffusion dimère-fermion.

Notre approche est toutefois limitée à basse énergie, car nous ne considérons pas

dans les vertex la possibilité de dissociation des dimères lorsque l'énergie cinétique des particules devient plus importante que l'énergie de l'état lié. Ceci pourrait être traité diagrammatiquement en considérant un vertex plus général. Dans le cadre d'un développement, il faudra toutefois prendre en compte explicitement des termes d'ordre supérieur intervenant à plus haute énergie qui ne jouent aucun rôle à l'ordre de notre étude. Pour le problème à 4 corps, au vu des résultats, nous pouvons espérer mettre en évidence un lien plus profond avec le problème à 3 corps. Il faudrait également définir l'amplitude de diffusion dimère-dimère en fonction du vertex dimère-dimère. Ces propriétés pourraient être observées expérimentalement dans des mélanges de fermions ayant des masses bien différentes où dans des réseaux optiques afin de modifier la masse effective des particules. Le comportement de l'amplitude de diffusion (l'annulation de l'amplitude de diffusion) permettra peut-être d'observer de nouveaux phénomènes physiques.

Deuxième partie .

Thermodynamique d'un gaz de fermions ultra-froid

Chapitre 4

Description théorique de la transition BEC-BCS

Dans ce chapitre, nous présentons les méthodes théoriques permettant de traiter diagrammatiquement la phase superfluide. Celle-ci est caractérisée par la création de paires de particules d'impulsion opposée (paires de Cooper). Ceci permet de décrire qualitativement et quantitativement la transition BEC-BCS dans les gaz de fermions froids. Nous présentons de cette manière la théorie de Bardeen, Cooper et Schrieffer ainsi que des théories diagrammatiques plus élaborées comme celle de Nozières et Schmitt-Rink et l'approximation des échelles. Nous verrons qu'elles permettent d'obtenir de bons résultats quantitatifs. Pour finir, nous expliquons un problème de ces théories qui décrivent l'instabilité du gaz dans la transition BEC-BCS, ce qui n'a jamais été observé expérimentalement.

4.1. Traitement de la phase condensée

4.1.1. Hamiltonien dans la phase superfluide

Nous avons vu à la section (1.3), le formalisme perturbatif de la fonction de Green pour un système normal. Afin de traiter l'état superfluide, nous devons prendre en compte la création et la destruction de paires de Cooper. Si nous partons d'un état fondamental normal, nous ne pouvons engendrer qu'un état normal. En suivant [Noz63], nous modifions l'hamiltonien libre de (1.27) de la façon suivante :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi\left(\mathbf{k}\right) c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \lambda_k c^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow} + \sum_{\mathbf{k}} \lambda_k c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \tag{4.1}$$

où λ_k est une constante arbitraire que l'on considère réelle positive par souci de simplicité. De plus, on se limite au cas de potentiels chimiques et de masses égales pour les deux espèces. L'hamiltonien libre (4.1) se diagonalise par la méthode de Bogoliubov [Bog58] où les opérateurs des quasiparticules sont donnés par :

$$c_{\mathbf{k},\uparrow} = u_k b_{\mathbf{k},\uparrow} - v_k b^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow} \tag{4.2}$$

$$c_{-\mathbf{k},\downarrow} = u_k b_{-\mathbf{k},\downarrow} + v_k b^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} \tag{4.3}$$

En diagonalisant l'hamiltonien libre dans cette nouvelle base, on obtient l'expression des coefficients u_k et v_k :

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}\right)} \tag{4.4}$$

$$v_k = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}\right)} \tag{4.5}$$

où $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + \lambda_k^2}$ est l'énergie des quasiparticules et $\xi(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$, l'énergie cinétique des particules à laquelle on a soustrait le potentiel chimique. Dans la base des quasiparticules, l'hamiltonien libre (4.1) est diagonal et s'écrit :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[\xi(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})\right] + \sum_{\mathbf{k},\sigma} E(\mathbf{k})\, b^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} b_{\mathbf{k},\sigma} \tag{4.6}$$

Le premier terme de (4.6) est l'énergie de l'état fondamental alors que le second terme décrit l'énergie des quasiparticules. Les opérateurs annihilation et création de quasiparticules $b^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}$ et $b_{\mathbf{k},\sigma}$ sont définis par les relations (4.2) et (4.3). Nambu a proposé [Nam60] de réécrire le système sous forme matricielle en introduisant :

$$C_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{bmatrix} \tag{4.7}$$

On définit ainsi la matrice fonction de Green libre du système :

$$\begin{aligned} \bar{G}_0(\mathbf{k},t) = -i\left\langle \Psi_0 \left| T_t C_{\mathbf{k}}(t)\, C^{\dagger}_{\mathbf{k}} \right| \Psi_0 \right\rangle &= \begin{bmatrix} G_{0,\uparrow}(\mathbf{k},t) & F_0(\mathbf{k},t) \\ F_0^{\dagger}(\mathbf{k},t) & -G_{0,\downarrow}(-\mathbf{k},-t) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -i\left\langle \Psi_0 \left| T_t c_{\mathbf{k},\uparrow}(t)\, c^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} \right| \Psi_0 \right\rangle & -i\left\langle \Psi_0 \left| T_t c_{\mathbf{k},\uparrow}(t)\, c_{-\mathbf{k},\downarrow} \right| \Psi_0 \right\rangle \\ -i\left\langle \Psi_0 \left| T_t c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow}(t)\, c^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} \right| \Psi_0 \right\rangle & -i\left\langle \Psi_0 \left| T_t c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow}(t)\, c_{-\mathbf{k},\downarrow} \right| \Psi_0 \right\rangle \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{4.8}$$

où Ψ_0 représente l'état fondamental de l'hamiltonien libre (4.6). On reconnaît dans la diagonale de (4.8) la définition des fonctions de Green libres des deux espèces $G_{0,\uparrow}(\mathbf{k},t)$ et $-G_{0,\downarrow}(-\mathbf{k},-t)$. Deux nouvelles fonctions apparaissent dans les éléments non diagonaux et décrivent l'état condensé. $F_0(\mathbf{k},t)$ et son complexe conjugué sont appelées les fonctions de Green anormales libres. Pour calculer les éléments de la matrice (4.8), nous remplaçons les opérateurs c et $c^{\dagger}$ par leurs expressions (4.2) et (4.3) en fonction des opérateurs b et

$b^{\dagger}$. Pour les quasiparticules, seules les fonctions de Green normales sont non nulles. On peut le voir facilement dans l'expression de l'hamiltonien libre des quasiparticules (4.6). Nous obtenons alors la matrice fonction de Green libre en calculant ces deux fonctions. La matrice fonction de Green libre en transformée de Fourier s'écrit alors :

$$\bar{G}_0\left(\mathbf{k},\omega_k\right)=\left[\begin{array}{cc}\frac{\omega_k+\xi(\mathbf{k})}{\omega_k^2-\xi^2(\mathbf{k})-|\lambda_k|^2} & \frac{\lambda_k}{\omega_k^2-\xi^2(\mathbf{k})-|\lambda_k|^2}\\ \frac{\lambda_k^*}{\omega_k^2-\xi^2(\mathbf{k})-|\lambda_k|^2} & \frac{\omega_k-\xi(\mathbf{k})}{\omega_k^2-\xi^2(\mathbf{k})-|\lambda_k|^2}\end{array}\right] \tag{4.9}$$

Dans la section suivante, nous allons voir comment calculer la matrice fonction de Green en développant celle-ci, par une approche perturbative similaire au cas normal.

4.1.2. Développement perturbatif de la fonction de Green non diagonale

Nous nous plaçons maintenant à température finie et utilisons le formalisme de Matsubara définit à la section (1.3). On montre alors facilement que la matrice fonction de Green libre (4.9) à température finie est obtenue en changeant ω_k en $i\omega_{kn}$. En utilisant le temps imaginaire τ et la représentation en interaction des opérateurs, l'hamiltonien d'interaction s'écrit :

$$\begin{aligned}H_{\text{int}}\left(\tau\right)=g\sum_{\mathbf{p_1},\mathbf{p_2},\mathbf{q}}c^{\dagger}_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}\left(\tau^{+}\right)c^{\dagger}_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}\left(\tau^{+}\right)c_{\mathbf{p_2},\downarrow}\left(\tau\right)c_{\mathbf{p_1},\uparrow}\left(\tau\right)-\sum_{\mathbf{k}}\lambda_k c^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow}\left(\tau\right)c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow}\left(\tau\right)\\ -\sum_{\mathbf{k}}\lambda_k c_{-\mathbf{k},\downarrow}\left(\tau\right)c_{\mathbf{k},\uparrow}\left(\tau\right)\end{aligned} \tag{4.10}$$

où nous avons soustrait la perturbation ajoutée dans (4.1) afin que l'hamiltonien complet du système conserve le nombre de particules. On définit alors la matrice fonction de Green à température finie comme :

$$\bar{\mathcal{G}}\left(\mathbf{k},\tau\right)=-\frac{\left\langle T_\tau C_{\mathbf{k}}\left(\tau\right)C^{\dagger}_{\mathbf{k}}U\left(\beta\right)\right\rangle_0}{\left\langle U\left(\beta\right)\right\rangle_0}=\left[\begin{array}{cc}\mathcal{G}_{\uparrow}\left(\mathbf{k},\tau\right) & \mathcal{F}\left(\mathbf{k},\tau\right)\\ \mathcal{F}^{\dagger}\left(\mathbf{k},\tau\right) & -\mathcal{G}_{\downarrow}\left(-\mathbf{k},-\tau\right)\end{array}\right] \tag{4.11}$$

où, comme à la section (1.3), $\langle ...\rangle_0$ est la moyenne statistique pour un système sans interaction décrit par l'hamiltonien libre (4.6). Nous développons alors l'opérateur d'évolution qui s'écrit comme pour un système normal :

$$U\left(\beta\right)=T\exp\left[-\int_0^{\beta}d\tau_1 H_{\text{int}}\left(\tau_1\right)\right] \tag{4.12}$$

Pour illustrer le calcul diagrammatique, nous allons étudier l'ordre un en puissance de l'interaction. Le numérateur de la matrice fonction de Green à cet ordre est :

$$g \sum_{\mathbf{k_1},\mathbf{k_2},\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 \left\langle T_\tau C_{\mathbf{k}}(\tau)\, C_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger \left(\tau_1^+\right) c_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}^\dagger \left(\tau_1^+\right) c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau_1)\, c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau_1) \right\rangle_0 \tag{4.13}$$

Dans (4.13), nous négligeons la contribution venant des deux vertex proportionnels à λ_k dans l'hamiltonien d'interaction (4.10). En suivant [Noz63], nous pouvons éliminer leur contribution à la fin du calcul. Nous les négligeons donc dès à présent. Le principe du développement de la fonction de Green est le même que pour un système normal. Pour calculer la contraction d'ordre un (4.13), on utilise le théorème de Wick en calculant toutes les contractions possibles de deux opérateurs. A la différence de l'état normal, dans la phase superfluide les contractions du type $c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{\mathbf{q},\downarrow}$ et $c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger$ ne sont pas nulles. En effet, nous avons vu que dans cette phase les fonctions de Green anormales libres sont différentes de zéro. Plus précisément, les contractions supplémentaires s'écrivent :

$$\left\langle T_\tau c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)\, c_{-\mathbf{q},\downarrow} \right\rangle_0 = -\mathcal{F}_0(\mathbf{k},\tau)\, \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \tag{4.14}$$

$$\left\langle T_\tau c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger(\tau)\, c_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger \right\rangle_0 = -\mathcal{F}_0^\dagger(\mathbf{k},\tau)\, \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \tag{4.15}$$

Dans l'hamiltonien d'interaction (4.10), nous avons deux vertex supplémentaires proportionnels à λ_k. Dans la suite, nous n'étudierons pas leur contribution, car la perturbation est juste nécessaire pour mettre en place le formalisme. En pratique, à la fin du calcul, nous prendrons la limite où ces deux termes tendent vers zéro. Nous allons commencer par étudier la contribution à la fonction de Green normale du vertex proportionnel à g.

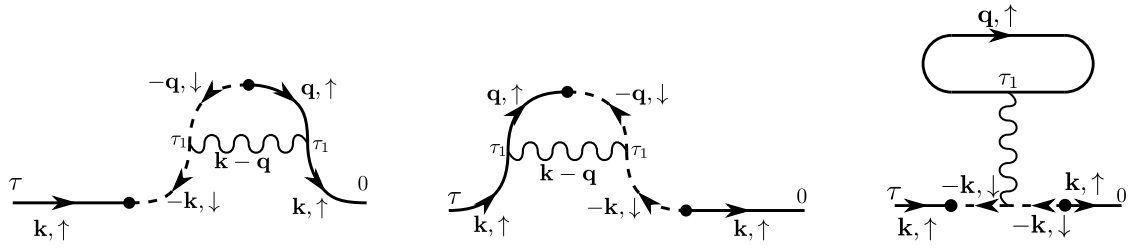
Fonction de Green normale

Considérons la fonction de Green normale de l'espèce $\uparrow$. Nous remplaçons donc dans (4.13), l'élément de matrice $C_{\mathbf{k}}(\tau)C_{\mathbf{k}}^\dagger$ par $c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger$. Nous obtenons un produit de six opérateurs dont trois de création et trois d'annihilation. En appliquant, le théorème de Wick, nous retrouvons les deux contributions de l'état normal, dont le diagramme non connexe (1.41) et le terme de Hartree (1.42). Leurs représentations diagrammatiques sont données respectivement sur les figures (1.2a) et (1.2b). Nous montrons qu'il existe trois contributions supplémentaires, dont le produit des contractions suivantes :

$$\begin{aligned} -g \sum_{\mathbf{p_1},\mathbf{p_2},\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 \underbrace{\left\langle T c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)\, c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau_1) \right\rangle_0}_{\mathbf{k}=-\mathbf{p_2}} \underbrace{\left\langle T c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau_1) \right\rangle_0}_{\mathbf{k}=\mathbf{p_1}} \underbrace{\left\langle T c_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger \left(\tau_1^+\right) c_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}^\dagger \left(\tau_1^+\right) \right\rangle_0}_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q}=-\mathbf{p_1}-\mathbf{q}} \\ = g \sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 \mathcal{F}_0(\mathbf{k},\tau-\tau_1)\, \mathcal{G}_{0,\uparrow}(\mathbf{k},\tau_1)\, \mathcal{F}_0^\dagger(\mathbf{q},0) \end{aligned} \tag{4.16}$$

De la même manière que dans l'état normal, cette contribution peut être calculée simplement en identifiant les contractions aux fonctions de Green libres et en identifiant les vecteurs d'ondes à l'intérieur d'une contraction. Cette dernière étape revient à assurer la conservation des impulsions aux nœuds des diagrammes. Ainsi, nous pouvons écrire

la contribution (4.16) sous la forme diagrammatique de la figure (4.1a). La fonction de Green anormale $\mathcal{F}_0(\mathbf{k})$ décrivant la destruction d'une paire de Cooper est représentée par deux propagateurs d'espèce différente et d'impulsion opposée se réunissant en un point. Pour $\mathcal{F}_0$ les flèches entrent vers le point alors que pour $\mathcal{F}_0^\dagger$ les particules s'éloignent du point de création de la paire de Cooper.



(a) Diagramme correspondant à l'expression (4.16)

(b) Diagramme correspondant à l'expression (4.17)

(c) Diagramme correspondant à l'expression (4.18)

FIGURE 4.1.: Diagrammes d'ordre 1 du numérateur de la fonction de Green normale dans la phase superfluide

Le deuxième diagramme est représenté sur la figure (4.1b) et a pour expression analytique (4.17).

$$-g \sum_{\mathbf{p_1},\mathbf{p_2},\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 \underbrace{\left\langle T c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)\, c^\dagger_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}\left(\tau_1^+\right)\right\rangle_0}_{\mathbf{k}=\mathbf{p_1}+\mathbf{q}} \underbrace{\left\langle T c^\dagger_{\mathbf{k},\uparrow} c^\dagger_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}\left(\tau_1^+\right)\right\rangle_0}_{\mathbf{k}=\mathbf{q}-\mathbf{p_2}} \underbrace{\left\langle T c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau_1)\, c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau_1)\right\rangle_0}_{\mathbf{p_2}=-\mathbf{p_1}}$$
$$= g \sum_{\mathbf{p_1}} \int_0^\beta d\tau_1 \mathcal{G}_{0,\uparrow}(\mathbf{k}, \tau-\tau_1)\, \mathcal{F}_0^\dagger(\mathbf{k}, \tau_1)\, \mathcal{F}_0(\mathbf{p_1}, 0) \tag{4.17}$$

Pour finir avec la fonction de Green normale, le dernier diagramme supplémentaire est représenté sur la figure (4.1c) et a pour expression analytique (4.18).

$$g \sum_{\mathbf{p_1},\mathbf{p_2},\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 \underbrace{\left\langle T_\tau c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)\, c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau_1)\right\rangle_0}_{\mathbf{k}=-\mathbf{p_2}} \underbrace{\left\langle c^\dagger_{\mathbf{k},\uparrow} c^\dagger_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}\left(\tau_1^+\right)\right\rangle_0}_{\mathbf{k}=\mathbf{q}-\mathbf{p_2}} \underbrace{\left\langle c^\dagger_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}\left(\tau_1^+\right) c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau_1)\right\rangle_0}_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q}=\mathbf{p_1}}$$
$$= -g \sum_{\mathbf{p_1}} \int_0^\beta d\tau_1 \mathcal{F}_0(\mathbf{k}, \tau-\tau_1)\, \mathcal{F}_0^\dagger(\mathbf{k}, \tau_1)\, \mathcal{G}_0\left(\mathbf{p_1}, 0^-\right) \tag{4.18}$$

Comme pour le développement de la fonction de Green dans l'état normal, on peut montrer que les diagrammes non connexes s'éliminent avec le dénominateur de (4.11). De plus, la factorielle provenant du développement de l'exponentielle, dans (4.12), est exactement compensée par les différentes possibilités de contractions obtenues en appliquant le théorème de Wick au numérateur de (4.11). Plus généralement, on montre que

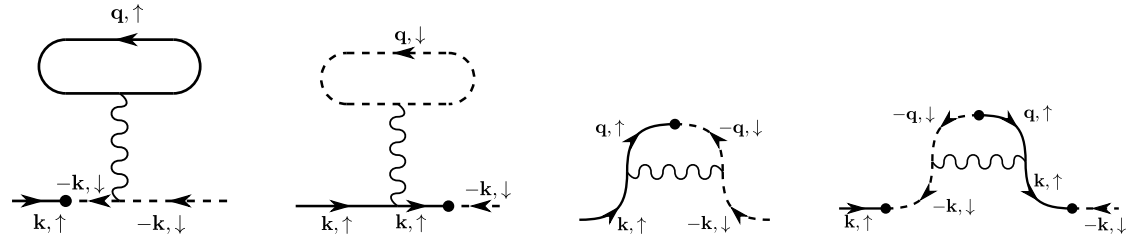
les règles de Feynman décrites à la section (1.3.3) restent valables si l'on prend bien en compte les deux nouveaux propagateurs [Noz63]. Nous allons maintenant dessiner les différents diagrammes contribuant à l'ordre un de la fonction de Green anormale.

Fonction de Green anormale

Pour le numérateur de la fonction de Green anormale $\mathcal{F}_0$ nous devons calculer les contractions de :

$$g \sum_{\mathbf{k_1},\mathbf{k_2},\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 \left\langle T_\tau c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau)\, c_{-\mathbf{k},\downarrow} c^\dagger_{\mathbf{p_1}+\mathbf{q},\uparrow}\left(\tau_1^+\right) c^\dagger_{\mathbf{p_2}-\mathbf{q},\downarrow}\left(\tau_1^+\right) c_{\mathbf{p_2},\downarrow}(\tau_1)\, c_{\mathbf{p_1},\uparrow}(\tau_1)\right\rangle_0 \tag{4.19}$$

Pour ce faire, nous devons dessiner tous les diagrammes possibles comportant un propagateur dirigé de gauche à droite pour l'espèce $\uparrow$ et d'impulsion $\mathbf{k}$ en entrée. En sortie nous devons avoir un propagateur de l'autre espèce d'impulsion $-\mathbf{k}$ et dirigé de droite à gauche. Nous devons les relier en utilisant les propagateurs libres normaux et anormaux et un vertex d'interaction. On peut facilement se convaincre que seulement quatre diagrammes contribuent à l'ordre un et qu'ils sont bien représentés sur la figure (4.2).



(a) Diagramme correspondant à l'expression (4.20)

(b) Diagramme correspondant à l'expression (4.21)

(c) Diagramme correspondant à l'expression (4.22)

(d) Diagramme correspondant à l'expression (4.23)

FIGURE 4.2.: Diagrammes d'ordre 1 contribuant à la fonction de Green anormale dans la phase superfluide

Comme dans l'état normal, il est plus commode de calculer ces diagrammes dans l'espace des fréquences selon les mêmes règles énoncées dans la section (1.3.3). Les expressions analytiques correspondant à ces quatre diagrammes sont respectivement :

$$g\mathcal{F}_0(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\sum_q \mathcal{G}_{0,\uparrow}(q)\,e^{i\omega_{qn}0^+} \tag{4.20}$$

$$g\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{F}_0(k)\sum_q \mathcal{G}_{0,\downarrow}(q)\,e^{i\omega_{qn}0^+} \tag{4.21}$$

$$-g\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\sum_q \mathcal{F}_0(q) \tag{4.22}$$

$$g\left[\mathcal{F}_0(k)\right]^2\sum_q \mathcal{F}_0^\dagger(q) \tag{4.23}$$

Nous allons maintenant prendre la limite où λ_k est nul pour obtenir les équations de Dyson dans la phase superfluide.

4.1.3. Équation de Dyson dans la phase superfluide

Pour calculer la fonction de Green, on écrit une équation de Dyson comme pour la fonction de Green dans l'état normal (section 1.3.4). Dans la phase superfluide nous devons donc écrire ce type d'équation mais pour une matrice. Au lieu d'avoir simplement une self-énergie, nous avons donc une matrice $\bar{\Sigma}$ appelée matrice self-énergie. L'équation de Dyson s'écrit d'une manière similaire à (1.47) :

$$\bar{\mathcal{G}}(k) = \bar{\mathcal{G}}_0(k) + \bar{\mathcal{G}}_0(k)\,\bar{\Sigma}(k)\,\bar{\mathcal{G}}(k) \tag{4.24}$$

où la matrice self-énergie s'écrit :

$$\bar{\Sigma}(k) = \begin{bmatrix} \Sigma_\uparrow(k) & \Delta(k) \\ \Delta^*(k) & -\Sigma_\downarrow(-k) \end{bmatrix} \tag{4.25}$$

Nous retrouvons dans la diagonale de (4.25), les self-énergies des espèces $\uparrow$ et $\downarrow$ introduites pour l'état normal et qui sont la somme de tous les diagrammes irréductibles en coupant un propagateur $(k,\uparrow)$ ou $(-k,\downarrow)$. Comme nous l'avons vu précédemment, la représentation diagrammatique de l'élément de matrice $\Sigma_\uparrow(k)$ a une ligne fermionique de l'espèce $\uparrow$ de quatre-impulsion k en entrée, et une autre en sortie. Toutes les deux sont dirigées de gauche à droite. On remarquera dans la matrice fonction de Green (4.8) que le dernier élément de la diagonale est $-\mathcal{G}_\downarrow(-k)$. Nous avons donc dans le dernier élément de la matrice (4.25) la fonction $-\Sigma_\downarrow(-k)$. Quant aux insertions non diagonales, nous les notons $\Delta(k)$ et $\Delta^*(k)$. Le premier a en entrée un propagateur $\uparrow$ de quatre-impulsion k dirigé de gauche à droite et en sortie, un propagateur $\downarrow$ de quatre-impulsion $-k$ dirigé de droite à gauche. Ce noyau est la somme de tous les diagrammes possibles ayant ces propagateurs externes et irréductibles en coupant un propagateur $(k,\uparrow)$ ou $(-k,\downarrow)$. Il décrit la destruction d'une paire de Cooper. On comprend alors que son complexe conjugué situé dans l'autre élément de matrice non diagonale décrit la création d'une paire de Cooper. Pour l'obtenir, il suffit d'inverser la direction des propagateurs libres externes. Nous représentons diagrammatiquement cette matrice sur la figure (4.3).

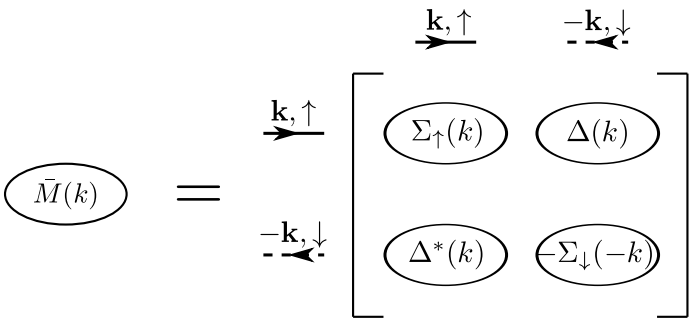


FIGURE 4.3.: Représentation diagrammatique de la matrice self-énergie (4.25).

Les propagateurs dessinés sur le côté de la matrice représentent le propagateur d'entrée dans les éléments de matrice et ceux du dessus le propagateur en sortie. Ils ne font pas partie de la matrice et ne doivent pas être pris en compte dans le calcul des noyaux. On peut alors prendre la limite où λ_k tend vers zéro. Les propagateurs anormaux libres ($\mathcal{F}_0$ et $\mathcal{F}_0^\dagger$) sont nuls, seuls les propagateurs normaux libres ne sont pas nuls. Graphiquement nous représentons par des traits fins les propagateurs normaux libres et par des doubles traits les propagateurs complets de la matrice (4.8). Nous devons remarquer que même si les propagateurs anormaux libres sont nuls, les propagateurs anormaux $\mathcal{F}$ et $\mathcal{F}^\dagger$ peuvent ne pas l'être dans la phase superfluide. Nous verrons ceci explicitement dans le cadre de la théorie BCS. Nous pouvons alors inverser l'équation matricielle (4.24) et utiliser l'expression des propagateurs normaux libres (4.9) pour obtenir la matrice fonction de Green en fonction de la matrice self-énergie (4.25). Connaissant l'expression de celle-ci, nous avons alors accès à la matrice fonction de Green à température finie dans la phase superfluide (4.11) selon :

$$\bar{\mathcal{G}}(k) = \frac{1}{D}\begin{bmatrix} i\omega_k + \xi(\mathbf{k}) + \Sigma_\downarrow(-k) & \Delta(k) \\ \Delta^*(k) & i\omega_k - \xi(\mathbf{k}) - \Sigma_\uparrow(k) \end{bmatrix} \tag{4.26}$$

où le dénominateur s'écrit :

$$D = [i\omega_k - \xi(\mathbf{k}) - \Sigma_\uparrow(k)][i\omega_k + \xi(\mathbf{k}) + \Sigma_\downarrow(-k)] - |\Delta(k)|^2 \tag{4.27}$$

Les équations de Dyson obtenues en développant l'équation (4.24) sont :

$$\mathcal{G}_\uparrow(k) = \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k) + \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\Sigma_\uparrow(k)\mathcal{G}_\uparrow(k) + \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\Delta(k)\mathcal{F}^\dagger(k) \tag{4.28}$$
$$\mathcal{F}^\dagger(k) = \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\Sigma_\downarrow(-k)\mathcal{F}^\dagger(k) - \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\Delta^*(k)\mathcal{G}_\uparrow(k) \tag{4.29}$$
$$\mathcal{G}_\downarrow(-k) = \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k) + \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\Sigma_\downarrow(-k)\mathcal{G}_\downarrow(-k) + \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\Delta^*(k)\mathcal{F}(k) \tag{4.30}$$
$$\mathcal{F}(k) = \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\Sigma_\uparrow(k)\mathcal{F}(k) - \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\Delta(k)\mathcal{G}_\downarrow(-k) \tag{4.31}$$

avec pour des fermions de masses différentes et de potentiels chimiques différents :

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}(k) = \left[i\omega_k - \xi_\sigma(\mathbf{k})\right]^{-1} \tag{4.32}$$

Nous avons représenté diagrammatiquement les équations (4.28), respectivement (4.29), sur les figures (4.4), respectivement (4.5).

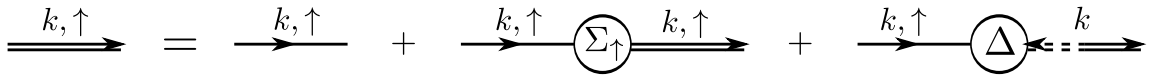


FIGURE 4.4.: Équation de Dyson pour $\mathcal{G}_\uparrow$ (4.28).

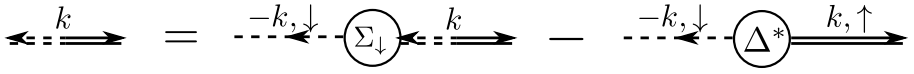


FIGURE 4.5.: Équation de Dyson pour $\mathcal{F}^\dagger$ (4.29).

Nous avons vu dans cette section comment étendre le formalisme diagrammatique de l'état normal à l'état superfluide. Nous allons maintenant appliquer ces concepts pour étudier le traitement en champ moyen, ou la théorie BCS. Puis nous utiliserons ces outils pour introduire l'approximation de la matrice T qui permet de traiter la transition BEC-BCS au-delà du champ moyen.

4.2. Traitement en champ moyen

Nous considérons dans la suite de ce chapitre un gaz constitué de deux espèces de masse identique, présentes en quantité égale. Nous avons donc $\mu_\uparrow = \mu_\downarrow$ et les self-énergies des deux espèces sont égales $\Sigma_\uparrow = \Sigma_\downarrow$. Nous omettons donc les indices de spin $\uparrow$ et $\downarrow$ dans la suite du chapitre.

4.2.1. Théorie BCS à température nulle

Nous pouvons obtenir simplement la théorie BCS dans le formalisme diagrammatique en considérant seulement l'ordre le plus bas du développement de la self-énergie non diagonale Δ et en négligeant les self-énergies diagonales Σ. Cette théorie est équivalente à une approximation de champ moyen. Nous représentons diagrammatiquement sur la figure (4.6) l'équation pour Δ, également appelée équation du gap BCS. Elle a pour expression analytique :

$$\Delta = \sum_q g\mathcal{F}_{\mathrm{BCS}}(q) \tag{4.33}$$

où dans l'équation (4.33), apparaît la sommation sur le quatre-vecteur q que nous avons déjà défini à température finie à la section (1.3.3). Nous comprenons alors que pour une interaction g de contact et instantanée, le paramètre d'ordre Δ est indépendant de la quatre-impulsion k.

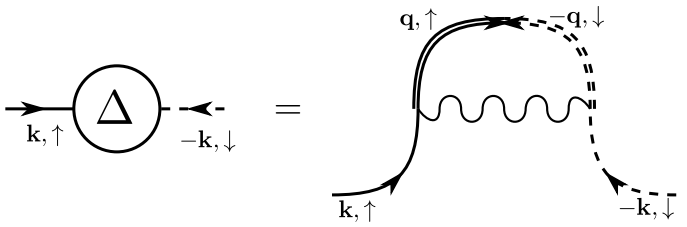


FIGURE 4.6.: Équation du gap BCS.

Les fonctions de Green dans la théorie BCS sont donc :

$$\mathcal{G}_{\mathrm{BCS}}(k) = \frac{i\omega_{kn} + \xi(\mathbf{k})}{[i\omega_{kn} - \xi(\mathbf{k})][i\omega_{kn} + \xi(\mathbf{k})] - |\Delta|^2} \tag{4.34}$$

$$\mathcal{F}_{\mathrm{BCS}}(k) = \frac{\Delta}{[i\omega_{kn} - \xi(\mathbf{k})][i\omega_{kn} + \xi(\mathbf{k})] - |\Delta|^2} \tag{4.35}$$

En général, pour réaliser la sommation sur les fréquences et lorsque l'intégrande décroît suffisamment vite à l'infini, nous transformons la sommation sur les fréquences de Matsubara en une intégrale sur le contour $\mathcal{C}$ qui tourne autour de l'axe imaginaire dans le sens horaire. En effet, il faut remarquer que la distribution de Fermi-Dirac (4.36) a des pôles d'ordre un et de résidu $-1/\beta$ en $\omega = i\omega_n$ les fréquences de Matsubara.

$$f(\omega) = [1 + \exp(\beta\omega)]^{-1} \tag{4.36}$$

Si une fonction g de $i\omega_n$ tend suffisamment vite vers zéro à l'infini, on peut transformer la sommation à température finie comme :

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_{qn}} g(i\omega_{qn}) \to \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_q}{2i\pi} f(\beta\omega_q)\, g(\omega_q) \tag{4.37}$$

Nous pouvons effectuer la sommation sur les fréquences dans l'équation (4.33) en remplaçant la fonction de Green anormale par son expression (4.35). Nous remarquons dans l'équation (4.33), que Δ ne dépend pas de la fréquence pour une interaction instantanée. Nous obtenons en remplaçant g par un potentiel $V(\mathbf{k}-\mathbf{q})$, l'équation du gap de Bardeen, Cooper et Schrieffer [BCS57]. Elle s'écrit à température nulle :

$$\Delta(\mathbf{k}) = -\sum_{\mathbf{q}} \frac{V(\mathbf{k}-\mathbf{q})\,\Delta(\mathbf{q})}{2\sqrt{\xi^2(\mathbf{q}) + |\Delta(\mathbf{q})|^2}} \tag{4.38}$$

Le nombre de particules de chaque espèce est simplement donné en sommant (4.34) :

$$n = 2n_\uparrow = 2n_\downarrow = 2\sum_q e^{i\omega_{qn}0^+}\mathcal{G}_{\mathrm{BCS}}(q) = \sum_{\mathbf{q}}\left\{1 - \frac{\xi(\mathbf{q})}{E(\mathbf{q})}\right\} \tag{4.39}$$

On montre dans cette théorie BCS que le gap tend vers zéro comme une exponentielle décroissante de l'interaction. Nous devons préciser que cette théorie n'est pas exacte dans cette limite de faible interaction car elle ne prend pas en compte l'interaction induite par le milieu. Gorkov et Melik-Barkhudarov [GMB61] ont montré comment considérer cet effet diagrammatiquement. Le comportement asymptotique est le même mais la constante devant l'exponentielle est modifiée par un facteur d'environ 1/2. Cette théorie décrivant bien qualitativement la physique d'un gaz de fermions sans interaction, nous allons maintenant voir comment étendre celle-ci à la transition vers le régime BEC.

4.2.2. Transition BEC-BCS à la BCS

Pour décrire la physique de la transition BEC-BCS, Leggett [Leg80] a proposé de relier la constante de couplage g à la longueur de diffusion. En substituant à l'interaction g, la régularisation de l'interaction de contact (1.54) nous obtenons, à température finie, l'équation du gap dans la transition BEC-BCS :

$$\frac{m}{2\pi a_{\uparrow,\downarrow}} = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left\{\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q})} - \frac{1-2f[E(\mathbf{q})]}{E(\mathbf{q})}\right\} \tag{4.40}$$

L'équation (4.40) relie Δ , μ et T. Comme dans la phase normale, le potentiel chimique est évalué en calculant la densité de particules en sommant la fonction de Green normale sur son quatre-vecteur. Nous pouvons de la même manière que pour l'équation du gap BCS (4.38) réaliser la sommation sur les fréquences. Pour des quantités égales, nous obtenons à température finie :

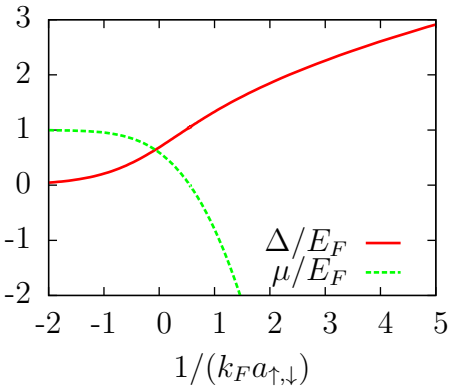
$$n = 2n_\uparrow = 2n_\downarrow = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left\{1 - \frac{\xi(\mathbf{q})}{E(\mathbf{q})}\left[1 - 2f(E(\mathbf{q}))\right]\right\} \tag{4.41}$$

où dans ces deux équations $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta|^2}$ et $\xi(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$. L'équation (4.41) relie n, Δ , μ et T. Nous avons donc deux équations couplées (4.40) et (4.41) pour le gap et le potentiel chimique que nous pouvons facilement résoudre quelle que soit la force de l'interaction. Ces équations donnent des fonctions thermodynamiques régulières sur toute la transition BEC-BCS. Nous représentons, par exemple, le gap Δ

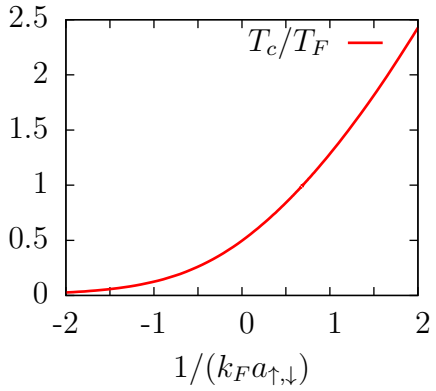
et le potentiel chimique μ à température nulle sur la figure (4.7a). Le vecteur d'onde de Fermi et l'énergie de Fermi sont définis par :

$$n_\sigma = \frac{k_{F,\sigma}^3}{6\pi^2} \tag{4.42}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \tag{4.43}$$



(a) Potentiel chimique et gap en fonction du paramètre de la transition donnés par la théorie BCS.



(b) Température de condensation en fonction du paramètre de la transition donnée par la théorie BCS.

FIGURE 4.7.: Fonctions thermodynamiques dans la théorie BCS

Cette théorie décrit qualitativement, une transition continue entre la limite d'attraction faible (BCS , $a_{\uparrow,\downarrow} \to 0^-$) et la limite d'attraction forte (BEC , $a_{\uparrow,\downarrow} \to 0^+$). Dans la limite BCS, nous observons simplement un gaz de fermion libre où le potentiel chimique est égal à l'énergie de Fermi. À l'opposé, dans la limite BEC, cette théorie donne un potentiel chimique négatif égal à la moitié de l'énergie de l'état lié $-|E_b|/2$. Nous remarquons que le potentiel chimique devient infiniment négatif dans cette limite ce qui correspond à la limite d'un gaz de bosons composites libres. Nous pouvons utiliser les équations (4.40) et (4.41) pour calculer la température de condensation le long de la transition BEC-BCS en prenant la limite où le gap Δ s'annule. Le résultat est représenté sur la figure (4.7b).

Nous constatons ici aussi que cette température est continue le long de la transition. Dans la limite BCS, elle est égale à la température de condensation des paires de Cooper. On montre que celle-ci est de l'ordre du gap qui est exponentiellement décroissant à faible interaction. Elle est donc beaucoup plus petite que l'énergie de Fermi, ce qui rend l'observation de la transition superfluide très difficile pour des gaz de fermions dilués. De l'autre côté, la température de transition diverge par rapport à la température de Fermi, car elle correspond à l'énergie nécessaire pour dissocier une paire. Nous pouvons également calculer l'énergie du gaz dans la limite BEC en utilisant la théorie BCS. Au premier ordre en puissance de $k_F a_{\uparrow,\downarrow}$, on retrouve bien l'énergie d'un gaz de bosons composites (voir chapitre 6) mais pour une longueur de diffusion dimère-dimère calculée

dans l'approximation de Born. On s'attend alors à ce que la température de condensation soit la même que pour un un gaz de bosons libres de masse $2m$ et de densité $n_\uparrow = n_\downarrow$. Dans la phase condensée, on peut s'intéresser au comportement du paramètre d'ordre Δ qui est alors différent de zéro. Nous avons représenté sur la figure (4.8) son comportement à l'unitarité ($a_{\uparrow,\downarrow} = \infty$). On observe que celui-ci se comporte comme $\sqrt{T_c - T}$.

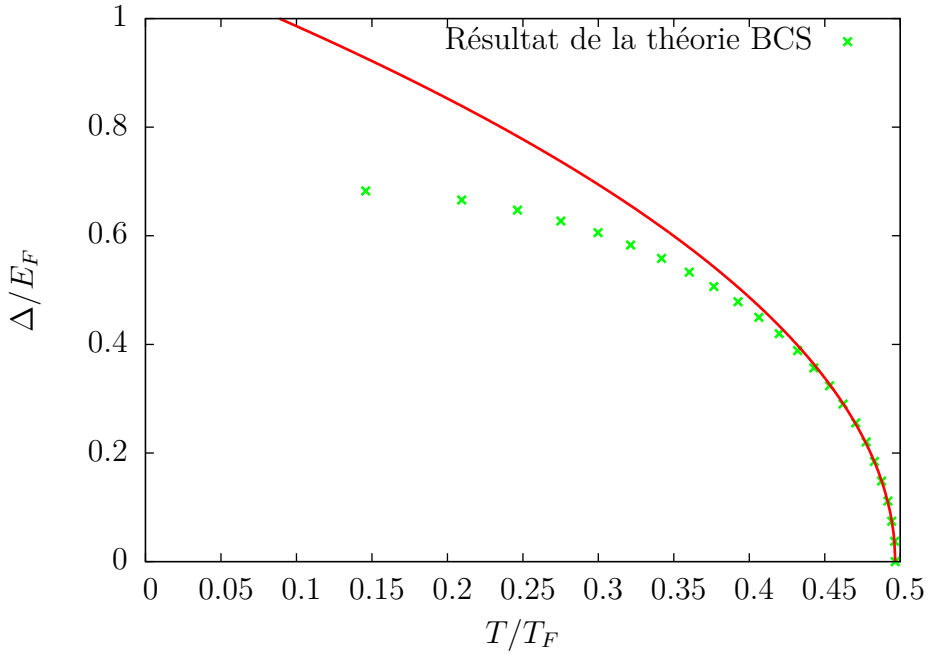


FIGURE 4.8.: Gap à l'unitarité en fonction de la température dans la théorie BCS. La ligne représente le développement en $\sqrt{T_c - T}$ près de la transition.

Nous avons vu que cette théorie BCS correspond à un développement diagrammatique en champ moyen et qu'elle donne une bonne analyse qualitative de la transition BEC-BCS. Elle donne de bons résultats dans la limite BCS qui peuvent être améliorés simplement avec les techniques diagrammatiques [GMB61]. Nous allons dans la suite nous intéresser à l'amélioration des résultats dans la limite BEC en améliorant le calcul de la fonction de Green et donc de la densité.

4.3. Développements d'ordre supérieur

Dans cette section, nous allons présenter des développements diagrammatiques plus élaborés que l'approximation de champ moyen, permettant de mieux décrire quantitativement la physique de la transition BEC-BCS et en particulier la limite BEC.

4.3.1. Théorie NSR

Approximation des échelles

Afin d'améliorer le calcul perturbatif de la fonction de Green, nous introduisons le vertex à deux corps Γ décrit sur la figure (4.9). Il correspond à tous les diagrammes

connectés avec une particule ↑ et une particule ↓ en entrée et en sortie.

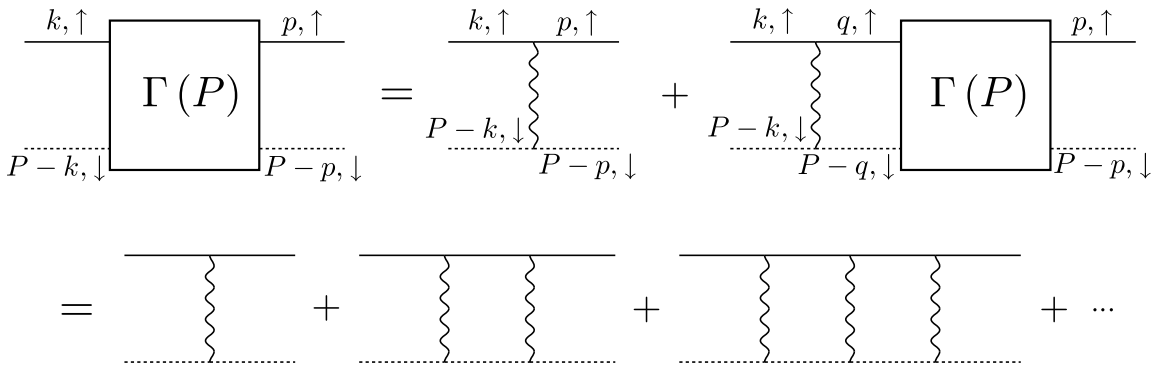


FIGURE 4.9.: Équation pour le vertex Γ dans l'approximation des échelles.

Dans la figure (4.9), nous considérons une interaction instantanée et de contact entre les fermions d'espèces différentes. On en déduit que le vertex, dans le cadre de cette approximation, ne dépend que de la quatre-impulsion totale P. Il est à remarquer que ce dernier est l'analogue du vertex de diffusion fermion-fermion dans le vide T_2, décrit à la section (1.4.2). Nous avons vu qu'il décrit correctement l'état lié à deux corps ainsi que le continuum des états de diffusion. Le vertex Γ est différent de T_2 car il prend en compte la température ainsi que le potentiel chimique des espèces non nul contrairement au cas de deux fermions dans le vide. L'expression analytique correspondant à la figure (4.9) est :

$$\Gamma(P) = g - g\Gamma(P) \sum_q \mathcal{G}_{0,\uparrow}(q)\, \mathcal{G}_{0,\downarrow}(P-q) \tag{4.44}$$

Nous régularisons Γ de la même manière qu'à la section (1.4.2). Nous effectuons la sommation sur les fréquences, en la transformant en une intégrale de contour dans le plan complexe. On peut également intégrer sur les angles. Nous obtenons à température finie l'expression suivante pour le vertex d'interaction :

$$\Gamma^{-1}(\mathbf{P}, i\omega_\nu) = \frac{m}{4\pi a_{\uparrow,\downarrow}} + \int_0^\infty \frac{dqq^2}{2\pi^2} \left\{ \frac{m}{\beta q P \left[\epsilon(\mathbf{q}) + \epsilon(\mathbf{P}/2) - \mu - i\omega_\nu/2\right]} \right. \\ \left. \times \log \frac{\cosh \beta/2 \left[\epsilon(P/2+q) - \mu\right]}{\cosh \beta/2 \left[\epsilon(P/2-q) - \mu\right]} - \frac{1}{2\epsilon(\mathbf{q})} \right\} \tag{4.45}$$

où $\omega_\nu = 2i\pi\nu/\beta$, $\nu \in \mathbb{Z}$, sont les fréquences de Matsubara bosoniques.

Température critique de condensation T_C

Dans la limite BEC, nous avons vu que la température de transition donnée par la théorie BCS ne correspond pas à la température de condensation de Bose-Einstein de molécules à laquelle on s'attend. Pour définir T_C, nous suivons [AGD65]. On peut, par

exemple, effectuer une analogie avec le gaz de bosons libres. Dans le cas de bosons libres, la fonction de Green s'écrit :

$$\mathcal{G}_{0,B}\left(\mathbf{k}, i\omega_\nu\right) = \left[i\omega_\nu - \epsilon\left(\mathbf{k}\right) + \mu_B\right]^{-1} \tag{4.46}$$

La température de condensation de Bose-Einstein est définie lorsque le potentiel chimique μ_B s'annule. Il est immédiat de constater qu'à la température critique, nous avons la condition $\mathcal{G}_{0,B}^{-1}\left(\mathbf{0}, 0\right) = 0$. L'analogue de la fonction de Green bosonique (4.46) dans notre système est le vertex d'interaction (4.45). Par analogie, la température critique de condensation est alors définie par l'annulation de l'inverse du vertex Γ. Soit :

$$\Gamma^{-1}\left(\mathbf{0}, 0\right) = 0 \tag{4.47}$$

Pour le vertex d'interaction (4.45), l'équation (4.47) se réduit à :

$$\frac{m}{4\pi a_{\uparrow,\downarrow}} = \int_0^\infty \frac{dqq^2}{2\pi^2}\left\{\frac{1}{2\epsilon\left(\mathbf{q}\right)} - \frac{\tanh\beta_c/2\left[\epsilon\left(\mathbf{q}\right) - \mu\right]}{2\left[\epsilon\left(\mathbf{q}\right) - \mu\right]}\right\} \tag{4.48}$$

Cette équation (4.48) est simplement l'équation du gap BCS (4.40) avec $\Delta = 0$. Dans la limite BEC, on définit alors le potentiel chimique des bosons composites μ_B comme :

$$2\mu = \mu_\uparrow + \mu_\downarrow = -\left|E_b\right| + \mu_B \tag{4.49}$$

Dans la limite BEC, la température de condensation des bosons composites de masse $2m$ et de densité $n/2$, vaut $k_B T_C = 4\pi/(2m) \times \left[n/2/\zeta(3/2)\right]^{2/3}$ et est de l'ordre de la température de Fermi $k_B T_F = (6\pi^2 n)^{2/3}/(2m)$. Or l'énergie de liaison E_b diverge comme le carré de l'inverse de la longueur de diffusion. On a donc une température critique de condensation bien plus petite que l'énergie de liaison $2|\mu| \gg T_C$. Dans cette limite, la tangente hyperbolique dans l'équation (4.48) vaut essentiellement 1 ($\beta_C|\mu| \gg 1$) près de la transition superfluide. On peut alors effectuer l'intégration sur le vecteur d'onde. On retrouve ainsi, à cet ordre du développement, la définition de la température critique pour un gaz de bosons composites de potentiel chimique μ_B :

$$\mu_B\left(T_c\right) = 0 \tag{4.50}$$

Fonction de Green "à la NSR"

Afin d'obtenir la fonction de Green, on insère le vertex Γ dans un diagramme de $\mathcal{G}_\uparrow$ en refermant la ligne $\downarrow$ comme représenté sur la figure (4.10). Ce diagramme représente physiquement l'interaction répétée (voir figure 4.9) de la particule $\uparrow$ sur les particules $\downarrow$. C'est donc une première amélioration pour tenir compte d'une forte interaction entre particules.

Elle s'écrit analytiquement comme :

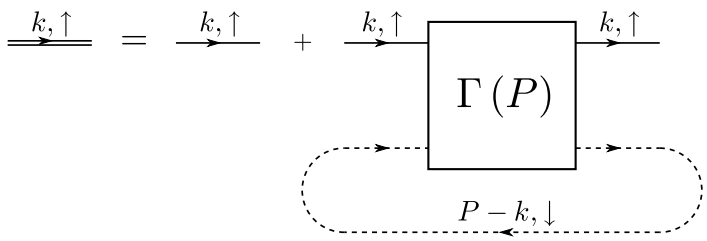


FIGURE 4.10.: Fonction de Green dans la théorie NSR.

$$\mathcal{G}_{\mathrm{NSR},\uparrow}(k) = \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k) + [\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)]^2 \sum_P \Gamma(P)\, \mathcal{G}_{0,\downarrow}(P-k) \tag{4.51}$$

Nozières et Schmitt-Rink ont montré [NSR85] que cette théorie décrit bien une transition continue entre les régimes BCS et BEC et donne une température de condensation dans la limite BEC égale à celle d'un gaz de bosons composites libres $T_c^{\mathrm{BEC}} \sim 0.218 T_F$. En particulier, dans la limite BEC, on obtient :

$$n = n_\uparrow + n_\downarrow = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{q^2}{4m} - \mu_B\right)} - 1} \tag{4.52}$$

L'équation (4.52) donne le nombre de particules égal au nombre de bosons (molécules) de masse $2m$ et de potentiel chimique μ_B.

4.3.2. Approximation de la matrice T

Description théorique

Bien que la théorie NSR donne de très bons résultats dans les deux cas limites, elle peut être étendue très simplement en prenant en compte l'équation de Dyson (1.47). En effet, dans l'équation diagrammatique de la figure (4.10), le second terme contient un propagateur libre de l'espèce ↑ en sortie du vertex Γ. Nous avons vu comment écrire l'équation de Dyson (4.24), afin de répéter un processus d'interaction indivisible si l'on coupe une ligne de propagateur $(k, \uparrow)$, en remplaçant le propagateur libre en sortie par la fonction de Green complète. Il suffit donc dans cette théorie d'écrire la self-énergie comme :

$$\Sigma_\uparrow(k) = \sum_P \Gamma(P)\, \mathcal{G}_{0,\downarrow}(P-k) \tag{4.53}$$

La fonction de Green dans l'état normal est alors définie par l'équation de Dyson (1.47).

Cas limites

Cette approximation a été étudiée en détails dans [CLK06]. En analysant les propriétés analytiques du vertex Γ et de la self-énergie, on peut obtenir des expressions analytiques pour certains cas limites. Dans le régime de haute température, on retrouve le développement du viriel jusqu'à l'ordre deux de Bethe-Uhlenbeck [BU37]. On peut également étudier le développement de la distribution $n(\mathbf{k})$ à grande impulsion k dont nous ferons une analyse détaillée dans le chapitre 5. Le développement est bien celui obtenu par Belyakov [Bel61]. Dans la limite BCS, on retrouve l'ordre un du développement du potentiel chimique en puissance de $k_F a_{\uparrow,\downarrow}$, et partiellement, le développement à l'ordre deux donné par Galitskii [Gal58]. Dans la limite BEC, cette approximation redonne bien le résultat d'un gaz de bosons libres de masse $2m$ pour la densité (4.52).

4.3.3. Extension à la phase superfluide

Une extension à la phase superfluide a été proposée par Pieri, Pisani et Strinati [PPS04]. L'idée est de définir un nouveau vertex Γ_{12} décrivant la création de quatre particules qui a donc quatre lignes de propagateurs fermioniques sortantes. Comme dans le cas normal, le processus le plus simple étant l'interaction via le potentiel de contact instantanée, on écrit une équation de Bethe-Salpeter en répétant celui-ci. En utilisant les fonctions de Green "à la BCS" (4.34) et (4.35), on voit que les vertex Γ_{11} décrivant la propagation d'une paire et Γ_{12} sont couplés par les équations diagrammatiques représentées sur les figures (4.11) et (4.12).

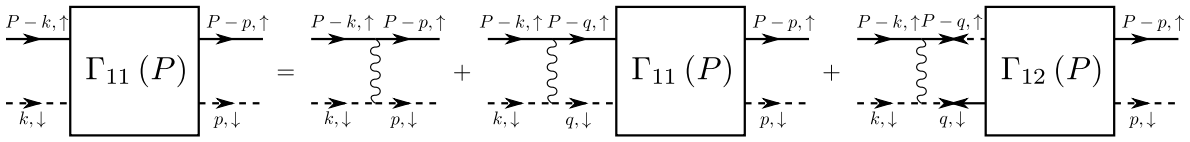


FIGURE 4.11.: Définition du vertex Γ_{11}.

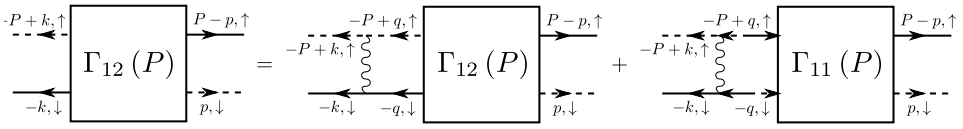


FIGURE 4.12.: Définition du vertex Γ_{12}.

Dans ces deux diagrammes, les lignes correspondent aux propagateurs normaux et anormaux "à la BCS" donnés par les équations (4.34) et (4.35). En utilisant le fait que l'interaction est instantanée et de contact, on montre que les vertex ne dépendent que de la quatre-impulsion totale P. Les expressions analytiques correspondantes sont :

$$\Gamma_{11}(P) = g - g\Gamma_{11}(P)\sum_q \mathcal{G}_{\mathrm{BCS},\uparrow}(P-q)\,\mathcal{G}_{\mathrm{BCS},\downarrow}(q) - g\Gamma_{12}(P)\sum_q \mathcal{F}_{\mathrm{BCS}}(P-q)\,\mathcal{F}_{\mathrm{BCS}}(q) \quad (4.54)$$

$$\Gamma_{12}(P) = -g\Gamma_{12}(P)\sum_q \mathcal{G}_{\mathrm{BCS},\uparrow}(-P+q)\,\mathcal{G}_{\mathrm{BCS},\downarrow}(-q) - g\Gamma_{11}(P)\sum_q \mathcal{F}^{\dagger}_{\mathrm{BCS}}(-P+q)\,\mathcal{F}^{\dagger}_{\mathrm{BCS}}(-q) \quad (4.55)$$

Dans ces deux expressions (4.54) et (4.55), on est naturellement amené à introduire les deux fonctions de réponse χ_{11} et χ_{12} définies comme suit :

$$\chi_{11}(P) = \frac{1}{g} - \sum_q \mathcal{G}_{\mathrm{BCS},\uparrow}(P-q)\,\mathcal{G}_{\mathrm{BCS},\downarrow}(q) \quad (4.56)$$

$$\chi_{12}(P) = \sum_q \mathcal{F}_{\mathrm{BCS}}(P-q)\,\mathcal{F}_{\mathrm{BCS}}(q) \quad (4.57)$$

Comme pour les vertex précédents, la constante g est exprimée en fonction de la longueur de diffusion (1.54) afin de régulariser la divergence à grande impulsion. Par définition de la fonction de Green anormale "à la BCS", on peut remarquer que la fonction $\chi_{12}(P)$ est paire en P. On peut alors inverser les équations couplées (4.54) et (4.55) afin d'obtenir l'expression du vertex de propagation de paire dans la phase superfluide :

$$\Gamma_{11}^{-1}(P) = \chi_{11}(P) - \frac{|\chi_{12}(P)|^2}{\chi_{11}(-P)} \quad (4.58)$$

À la transition superfluide le gap Δ s'annule ainsi que les fonction de Green anormales "à la BCS". Par suite, la fonction de réponse élémentaire χ_{12} et le vertex Γ_{12} tendent vers zéro. On retrouve alors l'expression du vertex Γ dans la phase normale pour le vertex Γ_{11} (4.56). La self-énergie diagonale est alors obtenue en remplaçant Γ par Γ_{11} dans (4.53). Pour la self-énergie non diagonale, on conserve l'approximation de champ moyen BCS Δ et l'équation du gap correspondante (4.40). Ceci permet de calculer la fonction de Green normale, donc le nombre de particule $n(\mu, T)$ (c'est à dire l'équation d'état) dans la phase superfluide.

4.4. Instabilité du gaz de fermions

La stabilité thermodynamique d'un gaz est obtenue lorsque la compressibilité isotherme χ_T est strictement positive. Autrement dit, si à température fixée on permet à un gaz de s'étendre dans un plus grand volume, sa pression doit diminuer. On montre que cette condition peut s'exprimer en fonction du nombre de particules et du potentiel chimique. La condition de stabilité est donc donnée par :

$$\chi_T = \frac{1}{n^2}\left.\frac{\partial n}{\partial \mu}\right|_T > 0 \tag{4.59}$$

4.4.1. État normal

La densité étant calculée en sommant la fonction de Green, d'après (4.59), nous devons évaluer la dérivée de la fonction de Green par rapport au potentiel chimique. D'après (1.47) et (4.53), la dérivée du vertex par rapport au potentiel chimique est également nécessaire. Nous avons vu qu'à la température de condensation le vertex Γ diverge (4.47). Plus précisément, la phase superfluide est caractérisée par l'apparition du mode de Goldstone qui décrit cette divergence à fréquence et vecteur d'onde nul. A cette température le vertex à fréquence nulle se comporte alors à petite impulsion comme $1/P^2$, ce qui ne pose pas de problème dans le calcul de la self-énergie (4.53). L'intégrale dans (4.53) est convergente quand $P \to 0$. Par contre, si on exprime la dérivée de la self-énergie par rapport au potentiel chimique, le mode de Goldstone implique que la dérivée du vertex par rapport à μ se comporte en $1/P^4$ ce qui rend l'intégrale divergente à basse énergie. Nous développons donc l'inverse du vertex (4.45) près de la transition superfluide et à basse énergie. Ce développement s'écrit :

$$\Gamma^{-1}\left(\mathbf{P}, i\omega_\nu = 0\right) \simeq_{P\to 0, \mu\to\mu_c^-} \alpha\frac{P^2}{2} + \gamma\left(\mu - \mu_c\right) \equiv \Gamma_{\mathrm{c}}^{-1}\left(P, \mu\right) \tag{4.60}$$

Nous cherchons à évaluer la dérivée par rapport au potentiel chimique à température constante. La transition apparaît pour un potentiel chimique critique μ_c. Il est à noter que le potentiel chimique augmente quand la température diminue. Dans la phase normale, nous avons donc $\mu - \mu_c < 0$. Les coefficients du développement sont réguliers et donnés par :

$$\alpha = \left.\frac{\partial^2\Gamma^{-1}\left(\mathbf{P}, 0\right)}{\partial P^2}\right|_{\mu=\mu_c, P=0} = -\sum_q \mathcal{G}_0^{(c)}\left(q\right)\left[\mathcal{G}_0^{(c)}\left(-q\right)\right]^2\left[\frac{8}{3m}\epsilon\left(\mathbf{q}\right)\mathcal{G}_0^{(c)}\left(-q\right) + \frac{2}{m}\right] \tag{4.61}$$

$$\gamma = \left.\frac{\partial\Gamma^{-1}\left(\mathbf{P}, 0\right)}{\partial \mu}\right|_{\mu=\mu_c, P=0} = 2\sum_q \mathcal{G}_0^{(c)}\left(-q\right)\left[\mathcal{G}_0^{(c)}\left(q\right)\right]^2 \tag{4.62}$$

où l'exposant $^{(c)}$ signifie que nous évaluons la fonction de Green à la transition critique. Les expressions de ces fonctions sont compliquées mais leur calcul est élémentaire. En particulier, on montre que α est négatif alors que γ est positif. On ajoute et soustrait le comportement à basse énergie près de la transition (4.60) dans la self-énergie (4.53) afin de calculer la dérivée de cette fonction par rapport au potentiel chimique. On peut vérifier qu'en soustrayant le comportement (4.60), la quantité obtenue est régulière. Il nous reste à évaluer la quantité divergente à petite impulsion $\mathbf{P}$ que l'on a soustrait (4.60) :

$$\Sigma_{\mathrm{c}}(k) = \mathcal{G}_0^{(c)}(-k)\, T \sum_{\mathbf{P}} \Gamma_{\mathrm{c}}(P, \mu) \tag{4.63}$$

En dérivant cette expression par rapport au potentiel chimique à température constante, on montre que le terme provenant de la dérivée de la fonction de Green ne pose aucun problème. Seul celui provenant de la dérivée du vertex développé est singulier à la transition. Après calcul, nous trouvons que le comportement dominant de la self-énergie est donné par :

$$\left.\frac{\partial \Sigma(k)}{\partial \mu}\right|_T \sim_{\mu \to \mu_c} -\mathcal{G}_0^{(c)}(-k)\, \frac{|\gamma|^{1/2}}{\pi (2|\alpha|)^{3/2}} \frac{T}{\sqrt{\mu_c - \mu}} \tag{4.64}$$

On obtient donc que la dérivée de la self-énergie par rapport au potentiel chimique à température constante diverge lors de la transition superfluide. Cela a une conséquence sur la compressibilité. On peut l'évaluer en utilisant le résultat (4.64) appliqué à la dérivée de la densité par rapport au potentiel chimique à température constante. On obtient finalement :

$$\chi_T \sim_{\mu \to \mu_c} \frac{\eta_N}{\sqrt{\mu_c - \mu}} \tag{4.65}$$

avec η_N un coefficient positif qui dépend seulement de la longueur de diffusion. En effet, le comportement dominant est donné par la racine carré de (4.65). Toutes les autres quantités sont régulières et lentement variables près de la transition superfluide. En fixant la force de l'interaction effective (la longueur de diffusion fermion-fermion) cette transition est alors repérée par un unique couple (μ_c, T_c). Un calcul élémentaire montre que le coefficient η_N est :

$$\eta_N = -\frac{|\gamma|^{1/2}}{\pi (2|\alpha|)^{3/2}} \sum_k \mathcal{G}_0^{(c)}(-k) \left[\mathcal{G}^{(c)}(k)\right]^2 > 0 \tag{4.66}$$

4.4.2. État superfluide

Dans la phase superfluide, nous pouvons effectuer la même analyse en développant le vertex (4.58) près de la transition. La différence vient du paramètre d'ordre Δ qui est différent de zéro dans cette phase et est déterminé par l'équation suivante :

$$\chi_{11}(P = 0) + \chi_{12}(P = 0) = 0 \tag{4.67}$$

On peut se convaincre que cette équation (4.67) est équivalente à l'équation du gap BCS en injectant les expressions (4.56) et (4.57). Près de la transition, nous pouvons

développer les fonctions de réponse élémentaires (4.56) et (4.57) en puissance de $|\Delta|^2$, $\mu - \mu_c$ et P^2. À fréquence bosonique nulle, on note les coefficients du développement :

$$\chi_{c,11}(\mathbf{P}, 0) \simeq_{P\to 0, \mu\to\mu_c^+, \Delta\to 0} \alpha\frac{P^2}{2} + \gamma(\mu - \mu_c) + \delta\frac{|\Delta|^2}{2} \tag{4.68}$$

$$\chi_{c,12}(\mathbf{P}, 0) \simeq_{P\to 0, \mu\to\mu_c^+, \Delta\to 0} -\frac{\delta}{2}\frac{|\Delta|^2}{2} \tag{4.69}$$

où α et γ sont définis dans les équations (4.61) et (4.62). L'expression de δ n'est pas utile car nous pouvons l'éliminer au profit des coefficients α et γ. En injectant les développements (4.68) et (4.69) dans l'équation du gap (4.67), on retrouve immédiatement le comportement du paramètre d'ordre près de la transition superfluide (voir figure 4.8). Soit :

$$|\Delta|^2 = \frac{4|\gamma|(\mu - \mu_c)}{|\delta|} \tag{4.70}$$

Nous utilisons alors les développements (4.68) et (4.69) dans l'expression du vertex (4.58) afin de soustraire la quantité divergente à énergie nulle dans le calcul de la self-énergie. En effectuant la même analyse qu'à la section précédente, nous obtenons l'expression de la dérivée de la self-énergie par rapport au potentiel chimique près de la transition superfluide :

$$\left.\frac{\partial\Sigma_{11}(k)}{\partial\mu}\right|_T \sim_{\mu\to\mu_c} \mathcal{G}_0^{(c)}(-k)\frac{|\gamma|^{1/2}}{4\pi|\alpha|^{3/2}}\frac{T}{\sqrt{\mu - \mu_c}} \tag{4.71}$$

Grâce à cette expression, nous pouvons obtenir de la même manière que précédemment la densité et la compressibilité dans la phase superfluide, près de la transition critique. Nous obtenons :

$$\chi_T \sim_{\mu\to\mu_c} -\frac{\eta_S}{\sqrt{\mu - \mu_c}} \tag{4.72}$$

avec η_S un coefficient positif qui dépend seulement de la longueur de diffusion. En effet le comportement dominant est donné par la racine carré de (4.72). On montre que le coefficient η_S est simplement :

$$\eta_S = \frac{\eta_N}{\sqrt{2}} > 0 \tag{4.73}$$

Nous avons calculé l'équation d'état dans l'approximation de la matrice T dans les phases normale et superfluide. Nous obtenons les résultats représentés sur la figure (4.13) pour l'équation d'état à l'unitarité.

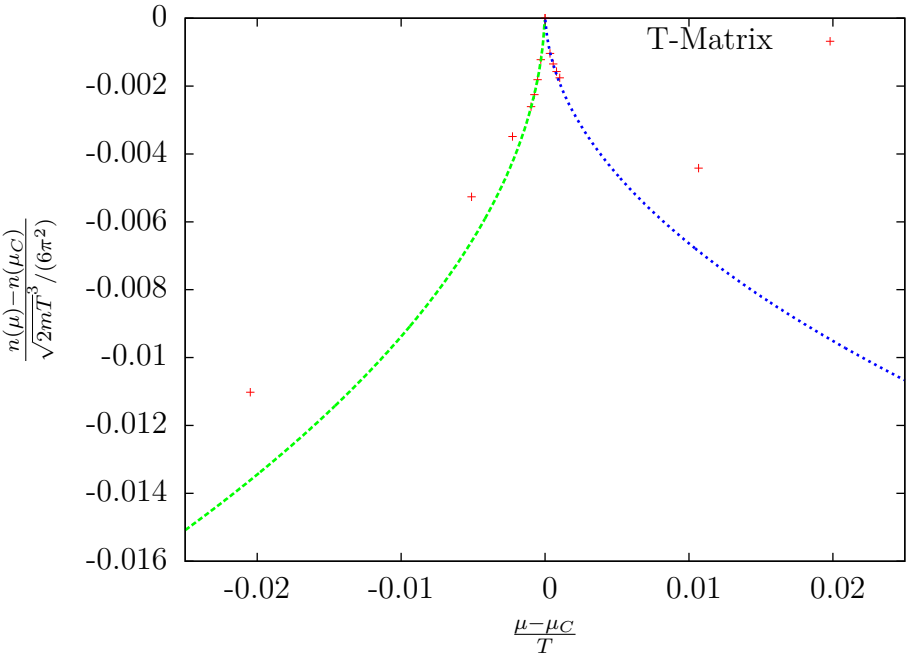


FIGURE 4.13.: Les points rouges sont les résultats numériques dans l'approximation de la matrice T à l'unitarité. Les développements analytiques sont donnés par (4.65) et (4.72). Pour $\mu - \mu_C$ négatif, le système est dans l'état normal. Lorsque le potentiel chimique est supérieur à μ_C le système est dans la phase superfluide. On constate qu'il existe une région où la pente est négative, le gaz est alors instable.

Nous constatons clairement que la dérivée de la densité par rapport au potentiel chimique diverge à la transition critique de condensation puis devient négative dans la phase superfluide. L'accord avec les développements est excellent. Ceci signifie que le gaz devient instable, ce qui n'a jamais été observé expérimentalement. Nous avons pu analyser les données obtenus par [HRCZ07] et nous mettons en évidence le même problème que dans l'approximation de la matrice T. Il est à noter que la théorie NSR a également le même problème.

4.4.3. Régularisation dans le cas du gaz de Bose

Nous ne savons pas comment résoudre ce problème mais nous pouvons faire une analogie avec le gaz de Bose libre. En dérivant la densité (4.52) par rapport au potentiel chimique, nous obtenons :

$$\left.\frac{\partial n\left(\mu_B, T\right)}{\partial \mu_B}\right|_{T=T_C} = \beta_C \sum_k \frac{e^{\beta_C \frac{k^2}{4m}}}{\left(e^{\beta_C \frac{k^2}{4m}} - 1\right)^2} \equiv \chi_\infty \tag{4.74}$$

où nous avons utilisé la propriété de la transition critique (4.50). Nous constatons

clairement une divergence dans la sommation quand le vecteur d'onde s'annule à cause du dénominateur. Nous pouvons régulariser ce problème en modifiant le potentiel chimique. En prenant en compte le terme de Hartree (voir figure 1.2b), cela revient à décaler le potentiel chimique $\mu_B \to \mu_B - gn_0$ avec n_0 la densité du gaz libre. De manière exacte, nous pouvons remplacer n_0 par la densité n, ce qui revient à écrire une équation auto-cohérente en remplaçant la boucle de la figure (1.2b) par le propagateur exact. En remplaçant μ_B par $\mu_B - gn(\mu, T)$, nous obtenons pour la dérivée de la densité par rapport au potentiel chimique :

$$\left.\frac{\partial n\left(\mu_B, T\right)}{\partial \mu_B}\right|_{T=T_C} = \left(1 - g \left.\frac{\partial n\left(\mu_B, T\right)}{\partial \mu_B}\right|_{T=T_C}\right) \chi_\infty \tag{4.75}$$

Nous obtenons toujours une contribution divergente mais qui est compensée par l'apparition du nouveau terme. Cette méthode est utilisée pour régulariser la divergence de la compressibilité à la transition critique d'un gaz de Bose et, est peut-être une première étape afin de régulariser la divergence dans l'approximation de la matrice T.

Chapitre 5

Énergie d'un gaz de fermions en interaction de contact

Nous avons présenté au chapitre précédent comment traiter diagrammatiquement la phase superfluide et décrit, dans des schémas d'approximations simples, comment obtenir les propriétés physiques du système. Dans ce chapitre, nous étudions la singularité apparaissant dans le calcul de l'énergie du système à la limite de potentiel de contact [CAL09]. Shina Tan a proposé [Tan08] une solution à celle-ci.

Dans la première section, nous étudions le comportement de la fonction d'onde d'une particule dans un puits de potentiel carré et nous montrons comment résoudre le problème de la divergence de l'énergie cinétique dans la limite de potentiel de contact. Nous présentons ensuite une nouvelle dérivation de la formule de Tan inspirée du traitement du problème à deux corps. Nous étudions ensuite les propriétés analytiques de la self-énergie, dans les phases normale et superfluide, afin de mettre en évidence via les théories diagrammatiques une équation analogue à la formule de Tan. Pour finir, nous calculons l'équation d'état dans l'approximation de la matrice des échelles à l'unitarité afin de la comparer aux récents résultats expérimentaux.

5.1. Problème à deux corps

5.1.1. Divergence de l'énergie cinétique

Nous commençons par rappeler le problème de la divergence de l'énergie cinétique dans la limite de potentiel de contact. Nous considérons dans cette section, la collision de deux particules interagissants via un puits carré de potentiel admettant un état lié. Dans le référentiel du centre de masse, cela revient à étudier la diffusion d'une particule fictive sur un potentiel $V(\mathbf{r})$ où $\mathbf{r}$ est la position relative des deux particules, soit :

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} & \text{pour } |\mathbf{r}| \leq r_0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{5.1}$$

où r_0 est la portée du potentiel que nous ferons tendre vers zéro à la limite de potentiel de contact. Nous considérons le cas d'un état lié d'énergie $E = -\hbar^2 k_E^2/(2m_{\uparrow,\downarrow})$. L'équation de Schrödinger admet alors deux solutions en onde s physiquement acceptables que nous notons :

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \psi_{\text{int}}(\mathbf{r}) & = \frac{\alpha \sin(\chi r)}{r} \quad \text{pour } |\mathbf{r}| \leq r_0 \\ \psi_{\text{BS}}(\mathbf{r}) & = \frac{\beta e^{-k_E r}}{r} \quad \text{sinon} \end{cases} \tag{5.2}$$

où $\chi^2 = k_0^2 - k_E^2$ et les constantes α et β, intervenant dans la fonction d'onde (5.2), peuvent être déterminées en utilisant les conditions de continuité et de normalisation de la fonction d'onde. α et β dépendent de l'énergie de la collision et des détails du potentiel. Connaissant $\psi(\mathbf{r})$, nous en déduisons alors l'énergie suivante :

$$E = \int d^3 r \psi^*(\mathbf{r}) \left[\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m_{\uparrow,\downarrow}} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) \tag{5.3}$$

Si nous prenons la limite de portée nulle, la fonction d'onde est simplement l'exponentielle décroissante de (5.2). Sa transformée de Fourier est alors donnée par :

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{\beta 4\pi}{\mathbf{k}^2 + k_E^2} \sim_{|\mathbf{k}| \to \infty} \frac{\psi_\infty}{\mathbf{k}^2} \equiv \psi_0(\mathbf{k}) \tag{5.4}$$

où nous avons pris la définition $\psi_\infty = \lim_{|\mathbf{k}| \to \infty} \mathbf{k}^2 \psi(\mathbf{k})$. Nous injectons alors la transformée de Fourier de la fonction d'onde (5.4) dans (5.3). La portée du potentiel étant nulle, seule l'énergie cinétique contribue à l'énergie totale. Nous obtenons ainsi :

$$E = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \frac{|\psi_\infty|^2}{(\mathbf{k}^2 + k_E^2)^2} \quad \text{(Divergent)} \tag{5.5}$$

À cause de l'élément d'intégration en k^2 et l'énergie cinétique en k^2, nous retrouvons bien la divergence de l'énergie cinétique dans la limite de potentiel de contact. Nous devons remarquer qu'à deux dimensions, il existe le même problème. La fonction d'onde a le même comportement à grande impulsion et l'élément d'intégration se comporte en k ce qui donne également une intégrale divergente.

5.1.2. Régularisation de la limite de contact

L'idée est alors de découper l'intervalle d'intégration en deux domaines. Le premier correspond à la région où les deux particules sont proches. Dans celle-ci le potentiel d'interaction est différent de zéro. Alors que dans la seconde, le potentiel est nul. Nous écrivons :

$$E = \frac{-\hbar^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \int_{|\mathbf{r}|<r_0} d^3r \psi^*_{\text{int}}(\mathbf{r}) \left(\Delta_{\mathbf{r}} + k_0^2\right) \psi_{\text{int}}(\mathbf{r}) + \frac{-\hbar^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \int_{|\mathbf{r}|>r_0} d^3r \psi^*_{\text{BS}}(\mathbf{r}) \Delta_{\mathbf{r}} \psi_{\text{BS}}(\mathbf{r}) \quad (5.6)$$

Dans le premier terme de (5.6), nous effectuons l'intégration sur le vecteur d'onde en utilisant la fonction d'onde ψ_{int} de (5.2). A la limite où cette portée tend vers zéro, nous obtenons que le premier terme se comporte comme :

$$\frac{-\hbar^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \int_{|\mathbf{r}|<r_0} d^3r \psi^*_{\text{int}}(\mathbf{r}) \left(\Delta_{\mathbf{r}} + k_0^2\right) \psi_{\text{int}}(\mathbf{r}) \sim_{r_0 \to 0} \frac{\hbar^2 k_E^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \frac{2}{3} k_E r_0 \quad (5.7)$$

qui tend bien vers zéro à la limite de potentiel de contact. On le comprend en remarquant que $\alpha \sim_{r_0 \to 0} 1/r_0$ et que la fonction d'onde n'est pas singulière dans le domaine d'interaction alors que la taille de cette région tend vers zéro. Pour le second terme de (5.6), nous le réécrivons comme une intégrale sur le domaine complet auquel on soustrait la région d'interaction. L'équation (5.6) devient :

$$E = \frac{-\hbar^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \int d^3r \psi^*_{\text{BS}}(\mathbf{r}) \Delta_{\mathbf{r}} \psi_{\text{BS}}(\mathbf{r}) - \frac{-\hbar^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \int_{|\mathbf{r}|<r_0} d^3r \psi^*_{\text{BS}}(\mathbf{r}) \Delta_{\mathbf{r}} \psi_{\text{BS}}(\mathbf{r}) + o(r_0) \quad (5.8)$$

Si nous prenons la limite de potentiel de contact dans le premier terme de (5.8), nous retrouvons l'énergie cinétique divergente (5.5). Pour le second terme, nous utilisons le prolongement analytique de la fonction d'onde de l'état lié ψ_{BS} dans la région d'interaction. Nous pouvons le relier à la longueur de diffusion [CT98], la fonction d'onde est donnée dans (1.26). Nous pouvons faire la même analyse pour un état de diffusion. L'allure de la fonction d'onde (5.2) est la même dans la région d'interaction. Pour des distances où le potentiel n'agit plus ($r > r_0$ mais $r \ll a_{\uparrow,\downarrow}$), on trouve facilement [CT98] qu'un état de diffusion de basse énergie se comporte, comme un état lié, en $1/r - 1/a_{\uparrow,\downarrow}$. Dans les deux cas, nous pouvons alors utiliser le même prolongement analytique dans la région d'interaction :

$$\psi_0(\mathbf{r}) \sim \beta \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a_{\uparrow,\downarrow}}\right) \quad r \ll a_{\uparrow,\downarrow} \quad (5.9)$$

Nous utilisons alors la fonction d'onde $\psi_0(\mathbf{r})$ dans le second terme de (5.8). La longueur de diffusion disparaît à cause du Laplacien. En utilisant la transformée de Fourier de $1/r$ qui est donnée par $4\pi/k^2$, nous obtenons simplement en permutant les intégrales sur $\mathbf{k}$ et $\mathbf{r}$:

$$E = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \left[|\psi_{\text{BS}}(\mathbf{k})|^2 - \frac{4\pi\beta}{k^2} \int_{|\mathbf{r}|<r_0} d^3r \beta^* \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a_{\uparrow,\downarrow}}\right) e^{-i\mathbf{kr}} \right] \quad (5.10)$$

Notons, qu'à la limite de potentiel de contact, le coefficient $4\pi\beta$ est simplement ψ_∞

défini à l'équation (5.4). Le comportement de la fonction d'onde à grande impulsion doit être relié au comportement de celle-ci à courte distance. La fonction intervenant dans l'intégrale de (5.10) se calcule facilement et vaut :

$$\int_{|\mathbf{r}|<r_0} d^3r\beta^* \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a_{\uparrow,\downarrow}}\right) e^{-i\mathbf{kr}} = \frac{4\pi\beta^*}{k^2}\left\{1 - \left[\left(1 - \frac{r_0}{a_{\uparrow,\downarrow}}\right)\cos(kr_0) + \frac{1}{ka_{\uparrow,\downarrow}}\sin(kr_0)\right]\right\}$$
$$\equiv \frac{4\pi\beta^*}{k^2}\left[1 - f(k, r_0)\right] \tag{5.11}$$

L'intégration sur le vecteur d'onde dans (5.10) du terme dépendant de r_0 dans (5.11) est alors effectuée. L'intégration du cosinus donne des termes en $\delta(r_0)$ qui ne contribuent pas à la limite de potentiel de contact. Alors que le sinus donne une constante ne dépendant pas de r_0, sachant que $\int_0^\infty \sin(x)/x = \pi/2$, nous trouvons finalement en prenant la limite $r_0 \to 0$:

$$E = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}}\left[|\psi(\mathbf{k})|^2 - \frac{|\psi_\infty|^2}{k^4}\right] + \frac{\hbar^2|\psi_\infty|^2}{8\pi m_{\uparrow,\downarrow}a_{\uparrow,\downarrow}} \tag{5.12}$$

où dans l'équation (5.12), nous avons utilisé le comportement asymptotique de la fonction d'onde ψ_∞ donné dans l'équation (5.4). Nous constatons alors que le comportement divergent à grande distance est exactement compensé par soustraction du comportement asymptotique dominant. Un nouveau terme est présent et dépend de la masse, de la longueur de diffusion et de la constante $|\psi_\infty|^2$. Nous avons vu que celle-ci est reliée au comportement de la fonction d'onde à courte distance entre les particules. C'est un paramètre à deux corps. Pour exemple, nous pouvons calculer l'énergie de l'état lié dont la fonction d'onde [GPS08] est donnée par (1.26). Nous calculons alors sa transformée de Fourier :

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{8\pi/a_{\uparrow,\downarrow}}{\mathbf{k}^2 + a_{\uparrow,\downarrow}^{-2}} \tag{5.13}$$

En utilisant son expression dans (5.12) ainsi que son comportement asymptotique donné par $\psi_\infty = 8\pi/a_{\uparrow,\downarrow}$, nous pouvons réaliser l'intégration sur le vecteur d'onde. Nous obtenons ainsi la bonne valeur de l'énergie de l'état lié :

$$E_b = \frac{-\hbar^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}a_{\uparrow,\downarrow}^2} \tag{5.14}$$

5.2. Problème à N corps

5.2.1. Formule de Tan

Dans cette section, nous nous intéressons à un gaz constitué d'un mélange de deux espèces de fermions ↑ et ↓. Les fermions ont respectivement des masses $m_\uparrow$ et $m_\downarrow$ et sont présents en nombres $N_\uparrow$ et $N_\downarrow$. Pour un système en interaction de contact, il est bien connu que la distribution en impulsion $n_\sigma(\mathbf{k})$ a une décroissance algébrique en $1/k^4$ [Bel61]. L'énergie cinétique est alors divergente à 2 et à 3 dimensions. Dans ce contexte, Shina Tan a proposé une formule pour le calcul de l'énergie [Tan08] qui résoud cette divergence. Pour des masses égales, la formule s'écrit :

$$E = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \left[n_\sigma(\mathbf{k}) - \frac{C}{k^4} \right] + \frac{\hbar^2 C}{4\pi m a_{\uparrow,\downarrow}} \tag{5.15}$$

où $C = \lim_{k\to\infty} k^4 n_\sigma(\mathbf{k})$ est appelé le paramètre de contact. Nous constatons alors que le terme entre crochet de (5.15) est simplement l'énergie cinétique à laquelle on soustrait le comportement asymptotique dominant. Il apparaît un nouveau terme qui dépend du paramètre de contact, de la masse et de la longueur de diffusion. Nous devons remarquer l'analogie avec la formule obtenue dans le cas de la collision de deux particules en interaction de contact (5.12). Nous allons maintenant présenter une nouvelle dérivation de la formule (5.15) en suivant les mêmes idées qu'à la section précédente.

5.2.2. Dérivation

Dans le cas général, nous notons $\mathbf{r}_i$ les positions des particules ↑, où $i = \{1, ..., N_\uparrow\}$. Pour les particules de l'espèce ↓, la position est notée $\boldsymbol{\rho}_j$ où $j = \{1, ..., N_\downarrow\}$. Pour une interaction à deux corps entre fermions ↑ et ↓, l'hamiltonien du système s'écrit $H = H_c + H_{\text{int}}$ avec :

$$H_c = -\sum_i \frac{\hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}_i}}{2m_\uparrow} - \sum_j \frac{\hbar^2 \Delta_{\boldsymbol{\rho}_j}}{2m_\downarrow} \tag{5.16}$$

$$H_{\text{int}} = \sum_{i,j} V\left(\mathbf{r}_i - \boldsymbol{\rho}_j\right) \tag{5.17}$$

Nous obtenons alors l'énergie en calculant :

$$E = \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \int \Pi_{i,j} d^3 r_i d^3 \rho_j \Phi^* \left(\{\mathbf{r}_i\}, \left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\} \right) \left(H_c + H_{\text{int}}\right) \Phi \left(\{\mathbf{r}_i\}, \left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\} \right) \tag{5.18}$$

où Φ est la fonction d'onde à N corps. Pour des potentiels décroissant suffisamment vite quand la distance entre les particules augmente, nous considérons que le potentiel a une portée r_0 finie, telle qu'il est nul pour des distances entre deux particules plus grandes que r_0.

Le volume où deux particules interagissent via H_{int} est de l'ordre de r_0^3. Les particules $\uparrow$ n'interagissant qu'avec les $\downarrow$, il y a donc $N_\uparrow N_\downarrow$ régions de ce type ce qui constitue un volume "d'interaction" de l'ordre de $N_\uparrow N_\downarrow r_0^3$. En comparant au volume d'intégration total qui est de l'ordre de la distance moyenne entre particules au cube, nous en déduisons que le rapport entre ces domaines est de l'ordre de $(r_0/d)^3$. Pour des gaz froids dilués, nous négligeons cette zone d'interaction. Il est à remarquer que la fonction d'onde ne doit pas être singulière dans cette région. Cela peut-être vérifié en étudiant le problème à deux corps (5.2). Comme dans la section précédente, la contribution dominante est donc l'énergie cinétique en dehors de la région d'interaction :

$$E = \int \Pi_{i,j} d^3 r_i d^3 \rho_j \Pi_{m,n} \Theta\left(|\mathbf{r}_m - \boldsymbol{\rho}_n| - r_0\right) \Phi^*\left(\{\mathbf{r}_i\}, \left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\}\right) H_c \Phi\left(\{\mathbf{r}_i\}, \left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\}\right) \tag{5.19}$$

Comme pour le problème à deux corps, si nous prenons la limite de potentiel de contact ($r_0 \to 0$) dans (5.19), nous obtenons la contribution divergente de l'énergie cinétique. Afin d'isoler celle-ci nous réécrivons l'intégrale comme :

$$\begin{aligned} \int \Pi_{i,j} d^3 r_i d^3 \rho_j \Pi_{m,n} \Theta\left(|\mathbf{r}_m - \boldsymbol{\rho}_n| - r_0\right) &= \int \Pi_{i,j} d^3 r_i d^3 \rho_j \Pi_{m,n} \left[1 - \Theta\left(r_0 - |\mathbf{r}_m - \boldsymbol{\rho}_n|\right)\right] \\ &\simeq \int \Pi_{i,j} d^3 r_i d^3 \rho_j \left[1 - \sum_{m,n} \Theta\left(r_0 - |\mathbf{r}_m - \boldsymbol{\rho}_n|\right)\right] \end{aligned} \tag{5.20}$$

Le produit entre crochets donne l'énergie cinétique divergente. Ensuite nous ne gardons seulement que les termes ne donnant au maximum qu'un Θ. Cela revient à négliger la possibilité que plus de 2 particules soient proches ($|\mathbf{r}_m - \boldsymbol{\rho}_n| < r_0$). Soit :

$$\begin{aligned} E &= \int \Pi_{i,j} d^3 r_i d^3 \rho_j \Phi^*\left(\{\mathbf{r}_i\}, \left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\}\right) H_c \Phi\left(\{\mathbf{r}_i\}, \left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\}\right) \\ &\quad - \sum_{m,n} \int_{|\mathbf{r}_m - \boldsymbol{\rho}_n| < r_0} \Pi_{i,j} d^3 r_i d^3 \rho_j \Phi^*\left(\{\mathbf{r}_i\}, \left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\}\right) H_c \Phi\left(\{\mathbf{r}_i\}, \left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\}\right) \\ &\equiv E_{\text{div}} - \sum_{m,n} E_{m,n} \end{aligned} \tag{5.21}$$

En transformée de Fourier, nous introduisons une coupure dans les intégrations sur le vecteur d'onde car nous séparons explicitement les contributions divergentes. A la fin du calcul, nous rassemblons les intégrales et nous pouvons ainsi faire tendre la coupure vers l'infini. Pour ne pas alourdir le calcul, nous ne mentionnons pas explicitement cette coupure mais nous devons garder à l'esprit que les intégrations sur le vecteur d'onde sont limitées par la coupure k_c ($|\mathbf{k}| < k_c$). D'autre part, comme les particules $\uparrow$ (respectivement $\downarrow$) sont identiques, la fonction d'onde est antisymétrique par permutation de deux particules indiscernables. Nous pouvons alors montrer que chaque élément $\{m, n\}$ donne la même contribution. Nous obtenons simplement un facteur $N_\uparrow N_\downarrow$. Nous introduisons alors la transformée de Fourier de la fonction d'onde à N corps par rapport à toutes les variables :

$$\Phi\left(\{\mathbf{r}_i\},\left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\}\right)=\sum_{\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\}} e^{i\sum_i \mathbf{k}_i\mathbf{r}_i}e^{i\sum_j \mathbf{q}_j\boldsymbol{\rho}_j}\phi\left(\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\}\right) \tag{5.22}$$

En injectant l'expression (5.22) dans le premier terme de (5.21), l'intégration sur les positions peut être réalisée et donne des delta de Dirac. Nous obtenons immédiatement le premier terme divergent intervenant dans la formule de Tan (5.15) :

$$E_{\text{div}}=\sum_{\mathbf{k}_m}\frac{{\mathbf{k_m}}^2}{2m_\uparrow}n_\uparrow\left(\mathbf{k_m}\right)+\sum_{\mathbf{q}_n}\frac{{\mathbf{q_n}}^2}{2m_\downarrow}n_\downarrow\left(\mathbf{q_n}\right). \tag{5.23}$$

où les nombres d'occupations des deux espèces sont donnés par :

$$n_\uparrow\left(\mathbf{k_m}\right)=N_\uparrow\sum_{\left\{\mathbf{k}_{i\neq m}\right\},\{\mathbf{q}_j\}}\left|\phi\left(\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\}\right)\right|^2 \tag{5.24}$$

$$n_\downarrow\left(\mathbf{q_n}\right)=N_\downarrow\sum_{\{\mathbf{k}_i\},\left\{\mathbf{q}_{j\neq n}\right\}}\left|\phi\left(\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\}\right)\right|^2 \tag{5.25}$$

Comme nous l'avons vu, les particules étant identiques, nous obtenons un facteur $N_\uparrow$, respectivement $N_\downarrow$, en effectuant la sommation sur l'indice m, respectivement n. Concernant le second terme de (5.21), nous considérons par souci de clarté, le terme $E_{1,1}$. Dans l'intégrale apparaît la condition $|\mathbf{r}_1-\boldsymbol{\rho}_1|<r_0$ qui décrit que deux particules sont proches l'une de l'autre. Nous effectuons alors le changement de ces deux variables $\mathbf{r}_1$ et $\boldsymbol{\rho}_1$ dans le référentiel du centre de masse. La distance relative vaut $\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\boldsymbol{\rho}_1$ et la position du centre de masse est $\mathbf{R}=(m_\uparrow\mathbf{r}_1+m_\downarrow\boldsymbol{\rho}_1)/m_d$. De même dans l'espace de Fourier $\{\mathbf{k}_1,\mathbf{q}_1\}\rightarrow\{\mathbf{k},\mathbf{K}\}$. Pour des petites distances $\mathbf{r}$, la dépendance de la fonction d'onde est donnée par la solution du problème à deux corps. La fonction d'onde à N corps se réécrit alors comme :

$$|\mathbf{r}|=|\mathbf{r}_1-\boldsymbol{\rho}_1|<r_0\ll d,\quad \Phi\left(\{\mathbf{r}_i\},\left\{\boldsymbol{\rho}_j\right\}\right)\simeq\Psi_0\left(\mathbf{r}\right)\bar{\Phi}\left(\mathbf{R},\{\mathbf{r}_{i\neq1}\},\left\{\boldsymbol{\rho}_{j\neq1}\right\}\right) \tag{5.26}$$

où $\Psi_0(\mathbf{r})$ est le prolongement analytique de la fonction d'onde à deux corps défini à la section précédente (5.9). Nous pouvons alors remplacer dans $E_{1,1}$ les fonctions Φ et Φ^* par leur expression à courte distance entre deux particules (5.26). Nous suivons alors la même idée que pour le problème à deux corps en exprimant Φ en fonction de sa transformée de Fourier afin de faire agir la somme des laplaciens sur l'exponentielle de (5.22). Pour finir, nous effectuons les sommations sur les positions $\mathbf{R}$, $\mathbf{r}_{i\neq1}$ et $\boldsymbol{\rho}_{j\neq1}$ car il n'y aucune restriction sur leur domaine d'intégration. Celles-ci donnent simplement la transformée de Fourier de la fonction d'onde à $N-2$ corps $\bar{\Phi}^*$ sur toutes les variables positions excepté pour la distance relative entre les deux particules proches. Nous la notons $\bar{\phi}^*(\mathbf{K},\{\mathbf{k}_{i\neq1}\},\{\mathbf{q}_{j\neq1}\})$. Nous obtenons ainsi :

$$E_{1,1} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{K},\{\mathbf{k}_{i\neq 1}\},\{\mathbf{q}_{j\neq 1}\}} \left(\frac{\mathbf{k}^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} + \frac{\mathbf{K}^2}{2m_d} + \sum_{s\neq 1} \frac{\mathbf{k}_s^2}{2m_\uparrow} + \sum_{t\neq 1} \frac{\mathbf{q}_t^2}{2m_\downarrow} \right) \left| \bar{\phi}\left(\mathbf{K}, \{\mathbf{k}_{i\neq 1}\}, \{\mathbf{q}_{j\neq 1}\}\right) \right|^2 \psi_0(\mathbf{k}) \int_{r<r_0} d^3 r e^{i\mathbf{kr}} \Psi_0^*(\mathbf{r}) \quad (5.27)$$

Nous pouvons alors sommer sur l'impulsion $\mathbf{k}$ les trois termes d'énergie cinétique ne dépendant pas de $\mathbf{k}$. Nous obtenons alors une contribution d'ordre r_0 qui sera nulle à la limite d'interaction de contact et que nous négligeons donc dès maintenant. Concernant l'intégrale sur la position relative $\mathbf{r}$ des deux particules proches l'une de l'autre, nous retrouvons l'intégrale intervenant dans le problème à deux corps (5.11) $(1 - f(k, r_0))$. Pour le terme dépendant de la fonction f, nous intégrons sur le vecteur d'onde $\mathbf{k}$. Cela conduit à :

$$E_{1,1} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{K},\{\mathbf{k}_{i\neq 1}\},\{\mathbf{q}_{j\neq 1}\}} \frac{\mathbf{k}^2}{2m_{\uparrow,\downarrow}} \left| \psi_0(\mathbf{k}) \bar{\phi}\left(\mathbf{K}, \{\mathbf{k}_{i\neq 1}\}, \{\mathbf{q}_{j\neq 1}\}\right) \right|^2 - \sum_{\mathbf{K},\{\mathbf{k}_{i\neq 1}\},\{\mathbf{q}_{j\neq 1}\}} \left| \bar{\phi}\left(\mathbf{K}, \{\mathbf{k}_{i\neq 1}\}, \{\mathbf{q}_{j\neq 1}\}\right) \right|^2 \frac{|\psi_\infty|^2}{8\pi^2 m_{\uparrow,\downarrow} a_{\uparrow,\downarrow}} \quad (5.28)$$

Dans l'expression (5.28), nous allons voir que le premier terme régularise la divergence de l'énergie cinétique (5.23) et le second est l'analogue de la constante obtenue dans le problème à deux corps (5.12). Pour ce faire, nous devons déterminer le comportement à grande impulsion de la distribution (5.24). À grande impulsion $\mathbf{k}_1$, nous comprenons maintenant que la contribution dominante sera obtenue lorsque deux particules seront proches. Nous pouvons alors utiliser l'expression de la fonction d'onde à N corps en fonction de celle du problème à deux corps :

$$n_\uparrow(\mathbf{k}_1) \sim_{k_1\to\infty} N_\uparrow N_\downarrow \sum_{\mathbf{k}_{i\neq 1},\mathbf{q}_j} \left| \psi_0(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}_1) \bar{\phi}\left(\{\mathbf{k}_{i\neq 1}\}, \{\mathbf{q}_j\}\right) \right|^2 \quad (5.29)$$

Ici également, grâce à la propriété d'antisymétrisation de la fonction d'onde à N corps, les permutations des vecteurs d'onde de l'espèce $\downarrow$ donnent la même contribution. En effectuant la sommation sur l'indice n, nous obtenons un facteur $N_\downarrow$. En se plaçant dans le référentiel du centre de masse, nous obtenons le comportement asymptotique :

$$n_\uparrow(\mathbf{k}_1) \sim_{k_1\to\infty} \frac{1}{k_1^4} N_\uparrow N_\downarrow |\psi_\infty|^2 \sum_{\mathbf{K},\{\mathbf{k}_{i\neq 1}\},\{\mathbf{q}_{j\neq 1}\}} \left| \bar{\phi}\left(\mathbf{K}, \{\mathbf{k}_{i\neq 1}\}, \{\mathbf{q}_{j\neq 1}\}\right) \right|^2 \equiv \frac{n_4}{k_1^4} \quad (5.30)$$

Nous pouvons montrer facilement que le nombre d'occupation de l'espèce $\downarrow$ a le même comportement asymptotique. Nous reconnaissons ainsi dans (5.28) le comportement de la

distribution à grande impulsion (5.30). Dans l'équation (5.28), nous pouvons séparer les énergies cinétiques des différents types de particule $\epsilon_{\uparrow,\downarrow} = \epsilon_{\uparrow} + \epsilon_{\downarrow}$. Puis nous nous ramenons à nos variables initiales grâce au changement de variable $\mathbf{k} \to (m_{\downarrow}\mathbf{k}_1 - m_{\uparrow}\mathbf{q}_1)/m_d$. En utilisant l'identité $\sum_{\mathbf{k}}(1/k^2 - 1/k_1^2) = 0$, nous obtenons finalement en réintroduisant la coupure :

$$\sum_{m,n} E_{m,n} = -\sum_{|\mathbf{k}_1|<k_c} \epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}_1)\frac{n_4}{k_1^4} - \sum_{|\mathbf{q}_1|<k_c} \epsilon_{\downarrow}(\mathbf{q}_1)\frac{n_4}{q_1^4} + \frac{n_4}{8\pi a_{\uparrow,\downarrow} m_{\uparrow,\downarrow}} \tag{5.31}$$

En rassemblant les équations (5.23) et (5.31), nous obtenons en laissant la coupure tendre vers l'infini :

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k})\left[n_{\uparrow}(\mathbf{k}) - \frac{n_4}{k^4}\right] + \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\downarrow}(\mathbf{q})\left[n_{\downarrow}(\mathbf{q}) - \frac{n_4}{q^4}\right] + \frac{n_4}{8\pi a_{\uparrow,\downarrow} m_{\uparrow,\downarrow}} \tag{5.32}$$

où nous avons vu (5.30) que le paramètre de contact est donné par $n_4 = \lim_{k\to\infty} k^4 n_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \lim_{q\to\infty} q^4 n_{\downarrow}(\mathbf{q})$. (5.32) est la formule de Tan (5.15) où le comportement divergent de l'énergie cinétique est soustrait afin de régulariser celle-ci et un terme supplémentaire apparaît. Notre démonstration permet de mettre clairement en évidence l'origine de ce terme qui provient de l'interaction de contact de deux particules. Notons que dans (5.30), ce coefficient dépend de la fonction d'onde à N corps, donc du milieu.

5.2.3. Généralisations

Gaz de bosons

Notre démonstration est indépendante de la statistique fermionique ou bosonique des particules. Le résultat devrait donc être valable pour un gaz de bosons. Dans ce cas-ci, l'interaction a lieu entre particules de la même espèce et est caractérisée par la longueur de diffusion entre deux bosons. Nous pouvons alors suivre la même procédure qu'à la section précédente. Pour un gaz de densité n où les interactions entre bosons de masse m sont caractérisées par la longueur de diffusion a, nous obtenons à la limite d'interaction de contact :

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k})\left[n(\mathbf{k}) - \frac{n_4}{k^4}\right] + \frac{n_4}{8\pi m a} \tag{5.33}$$

où $n_4 = \lim_{k\to\infty} k^4 n(\mathbf{k})$. Nous obtenons ici aussi une régularisation de la divergence de l'énergie cinétique et l'apparition d'un terme dépendant du paramètre de contact n_4, de la longueur de diffusion entre bosons et de leur masse. Nous pouvons également généraliser ce résultat à un mélange de N espèces bosoniques ayant des densités n_i de particules de masse m_i où $i = 1, ..., N$. L'interaction entre les particules d'espèces i et j est caractérisée par la longueur de diffusion $a_{i,j}$. Nous obtenons ainsi :

$$E = \sum_{i=1}^{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_i(\mathbf{k}) \left[n_i(\mathbf{k}) - \frac{n_{4,i}}{k^4} \right] + \sum_{i,j} \frac{n_{4,i,j}}{16\pi m_{i,j} a_{i,j}} \tag{5.34}$$

où $n_{4,i} = \lim_{k\to\infty} k^4 n_i(\mathbf{k})$. La masse réduite du système de deux particules i - j est notée $m_{i,j}$ et $n_{4,i} = \sum_j n_{4,i,j}$. Nous remarquons que nous avons besoin de connaître le paramètre de contact $n_{4,i,j}$ associé à la diffusion des espèces i et j. Ce paramètre a une expression analogue à (5.30). Le même type de régularisation est obtenu ici. Si nous considérons $n_{4,i,i} = 0$ (pas de diffusion entre même espèce), nous retrouvons le résultat pour un mélange de N espèces fermioniques. Pour finir, nous notons que l'effet d'Efimov n'apparaît pas explicitement dans nos formules, mais devrait pourtant être présent dans la fonction d'onde à N corps que nous avons considérée. Selon [CW11], le comportement de la distribution à l'ordre suivant en impulsion doit alors décroître comme $\cos(\log(k))/k^5$ mais cela ne rend pas nos intégrales divergentes. Les auteurs suggèrent que pour 3 bosons, l'énergie ne serait pas correctement évaluée. Il est à noter qu'il est difficile d'extrapoler leur résultat à un gaz de N bosons dilués. Dans tous les cas, pour des fermions ayant un rapport des masses inférieur à 13.6, il n'y a pas de physique d'Efimov, et notre formule (5.32) doit être valable.

2 **dimensions**

Contrairement à 1 dimension où l'énergie cinétique n'est pas divergente, à 2 dimensions, il existe une divergence logarithmique. Nous avons vu que la dimension de l'espace n'apparaît pas dans notre procédure. En étudiant la collision de deux particules en interaction de contact, nous obtenons que la fonction d'onde se comporte comme [JRFG04] :

$$\Psi_0(\mathbf{r}) \sim_{r>r_0} \log\left(\frac{a_{\uparrow,\downarrow}}{r}\right) \tag{5.35}$$

où la fonction d'onde est donnée par la solution en onde s de $\Delta_{\mathbf{r}}\Psi_0(\mathbf{r}) = 0$. On montre alors facilement que sa transformée de Fourier à deux dimensions est également décroissante en $1/k^2$, ce qui donne bien un comportement divergent pour l'énergie cinétique. Nous pouvons alors calculer l'équivalent de la fonction f (5.11) qui dépend ici d'une fonction de Bessel de première espèce J_0. Puis de la même manière qu'à la section précédente, nous isolons le terme qui compense le comportement divergent et nous calculons le terme supplémentaire qui apparaît. Nous pouvons alors de nouveau prendre la limite d'une interaction de contact en gardant les coupures k_c et q_c afin d'obtenir :

$$\begin{aligned} E = \lim_{k_c\to\infty} \left[\sum_{k<k_c} \epsilon_\uparrow(\mathbf{k}) n_\uparrow(\mathbf{k}) - \frac{n_4}{4\pi m_\uparrow} \log(k_c a_{\uparrow,\downarrow}) \right] \\ + \lim_{q_c\to\infty} \left[\sum_{q<q_c} \epsilon_\downarrow(\mathbf{q}) n_\downarrow(\mathbf{q}) - \frac{n_4}{4\pi m_\downarrow} \log(q_c a_{\uparrow,\downarrow}) \right] + n_4 \frac{\log 2 - \gamma}{4\pi m_{\uparrow,\downarrow}} \end{aligned} \tag{5.36}$$

où ici également $n_4 = \lim_{k\to\infty} k^4 n_\uparrow(\mathbf{k}) = \lim_{q\to\infty} q^4 n_\downarrow(\mathbf{q})$. γ est la constante d'Euler.

Pour plus de détails sur le calcul, nous renvoyons le lecteur à la lecture de [CAL09].

5.3. Approche en théorie des champs

Nous allons voir dans cette partie comment la décroissance algébrique de la distribution en impulsion s'obtient dans le formalisme de la théorie des champs. Nous nous restreignons à partir de maintenant à un système de fermions d'espèces $\uparrow$ et $\downarrow$ de même masse et présentes en quantité égale. $n_\uparrow(\mathbf{k}) = n_\downarrow(\mathbf{k}) = n(\mathbf{k})$. Nous omettons donc l'indice de spin dans toutes les fonctions. Nous travaillons également à température finie.

5.3.1. Décroissance algébrique de la distribution en impulsion

Comme nous l'avons vu, pour obtenir la densité de particules nous devons sommer la fonction de Green sur son quatre-vecteur (1.36). La distribution en impulsion est donc simplement obtenue en sommant la fonction de Green sur les fréquences de Matsubara. En transformant cette sommation discrète en une intégrale de contour en utilisant les pôles de la distribution de Fermi-Dirac, nous obtenons l'expression usuelle :

$$n\left(\mathbf{k}\right) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_k}{2\pi i} e^{\omega_k 0^+} f\left(\omega_k\right) \mathcal{G}\left(\mathbf{k}, \omega_k\right) \tag{5.37}$$

où nous rappelons que le contour $\mathcal{C}$ tourne autour de l'axe imaginaire dans le sens horaire. Pour obtenir le comportement de la distribution à grande impulsion, le principe est alors d'étudier les propriétés analytiques de la fonction de Green en fonction de ω_k. Dans l'expression (5.37), pour réaliser l'intégrale de contour, nous pouvons déformer le contour en deux parties encerclant l'axe réel négatif $\mathcal{R}_-$ et l'axe réel positif $\mathcal{R}_+$. Pour de grandes impulsions, c'est à dire de grandes énergies cinétiques, nous nous attendons à ce que l'effet des interactions soit faible. La self-énergie décrivant ces interactions, doit être négligeable devant $\mathcal{G}_0^{-1}$. Nous développons donc l'équation de Dyson (1.46) en puissance de la self-énergie :

$$\mathcal{G}\left(\mathbf{k}, \omega_k\right) \sim \mathcal{G}_0\left(\mathbf{k}, \omega_k\right) + \left[\mathcal{G}_0\left(\mathbf{k}, \omega_k\right)\right]^2 \Sigma\left(\mathbf{k}, \omega_k\right) \tag{5.38}$$

Nous pouvons alors utiliser le premier terme de (5.38) dans (5.37). La contribution vient du pôle de la fonction de Green libre en $\omega_k = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$ et nous obtenons le résultat libre, c'est à dire la distribution de Fermi-Dirac. À grande impulsion, ce pôle a une partie réelle grande et positive et donne donc un facteur $e^{-k^2/(2mT)}$ négligeable devant une décroissance algébrique. Pour la même raison, le pôle d'ordre 2 de la fonction de Green libre dans le second terme de (5.38) donne également une contribution qui décroit exponentiellement. Il nous faut donc trouver les singularités de la self-énergie n'ayant pas une partie réelle grande et positive dans la limite de grande impulsion $\mathbf{k}$.

5.3.2. Self-énergie dans la phase normale

Nous commençons par analyser la self-énergie dans l'approximation de la matrice T (4.53). Nous transformons la sommation sur les fréquences de Matsubara bosonique en une intégrale de contour en utilisant les pôles de la distribution de Bose-Einstein. Nous obtenons ainsi :

$$\Sigma\left(\mathbf{k}, i\omega_{kn}\right) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\Omega_K}{2\pi i} b\left(\Omega_K\right) \sum_{\mathbf{K}} \Gamma\left(\mathbf{K}, \Omega_K\right) \mathcal{G}_0\left(\mathbf{K}-\mathbf{k}, \Omega_K - i\omega_{kn}\right) \tag{5.39}$$

Afin d'effectuer dans (5.39) l'intégrale sur la fréquence Ω_K, nous commençons par rappeler les propriétés du vertex Γ. Nous pouvons voir dans l'équation (4.45) que l'intégrande a une singularité pour $\Omega_K + 2\mu = 2\epsilon\left(\mathbf{q}\right) + 2\epsilon\left(\mathbf{K}/2\right) \geq K^2/(4m)$. Ceci correspond au continuum des états de diffusion que nous avons déjà rencontré dans le problème à deux corps (voir section 1.4.2). Il y a également possibilité de formation d'un état lié à deux corps. Les singularités du vertex Γ sont, dans les deux cas, bornées par une énergie minimale $\Omega_{\min} = K^2/4m - 2\mu$. A grande impulsion cette énergie est de l'ordre de $K^2/(4m)$, l'énergie du centre de masse.

Pour effectuer l'intégration sur l'énergie Ω_K dans (5.39), nous pouvons tout d'abord prendre en compte le pôle de la fonction de Green en $\Omega_K = i\omega_{kn} + \epsilon(\mathbf{K}-\mathbf{k}) - \mu$, ce qui donne la contribution à la self-énergie :

$$\Sigma_L\left(\mathbf{k}, \omega_k\right) = \sum_{\mathbf{K}} b\left[\omega_k + \epsilon(\mathbf{K}-\mathbf{k}) - \mu\right] \Gamma\left[\mathbf{K}, \omega_k + \epsilon(\mathbf{K}-\mathbf{k}) - \mu\right] \tag{5.40}$$

où nous avons écrit le prolongement analytique de la self-énergie sur l'axe réel des fréquences ($i\omega_{kn} \to \omega_k$). Afin d'obtenir la décroissance algébrique, nous devons trouver les singularités en fonction de ω_k n'ayant pas de partie réelle grande et positive à grande impulsion $\mathbf{k}$. Nous voyons immédiatement dans (5.40), qu'à grande impulsion $\mathbf{k}$, la distribution de Bose-Einstein donne un facteur $e^{-k^2/(2mT)}$ qui rend cette contribution négligeable pour la décroissance algébrique. Sauf si l'impulsion du centre de masse $\mathbf{K} \simeq \mathbf{k}$. Dans ce cas le facteur ϵ est négligeable et nous obtenons un facteur $\Gamma\left(\mathbf{K}, \omega_k - \mu\right)$. Or nous avons vu précédemment que les singularités du vertex $\Gamma(\mathbf{K}, \Omega_K)$ sont bornées par l'énergie du centre de masse $K^2/(4m) \simeq k^2/(4m)$. Nous en déduisons donc que cette contribution à la self-énergie a des singularités en $\omega_k \simeq \frac{k^2}{4m}$. Cette contribution donne également une décroissance exponentielle.

Nous concluons que la décroissance algébrique provient obligatoirement du pôle de la fonction de Green dans (5.39) en $\omega_k = \Omega_K - \epsilon(\mathbf{K}-\mathbf{k}) + \mu$. Nous suivons [CLK06] en introduisant une nouvelle fonction Σ_Γ qui prend en compte dans la sommation sur l'énergie Ω_K seulement les singularités du vertex Γ. Ce dernier a des singularités sur l'axe réel des fréquences, comme nous avons discuté précédemment. On trouve [CLK06] :

$$\Sigma_\Gamma\left(\mathbf{k}, \omega_k\right) = \sum_{\mathbf{K}} \int_{\Omega_{\min}}^{\infty} \frac{d\Omega_K}{\pi} b\left(\Omega_K\right) \operatorname{Im}\left[\Gamma\left(\mathbf{K}, \Omega_K + i0^+\right)\right] \mathcal{G}_0\left(\mathbf{K}-\mathbf{k}, \Omega_K - i\omega_{kn}\right) \tag{5.41}$$

En pratique, nous voyons dans (5.41), que la fréquence Ω_K est limitée par la distribution de Bose-Einstein à des énergies de l'ordre de la température $\Omega_K \lesssim T$. L'intégration sur les fréquences tournant autour des singularités de Γ, cela implique que la sommation sur les vecteurs d'onde est également bornée. À grande impulsion, le pôle est simplement situé en $\omega_k \simeq -\epsilon(\mathbf{k})$, nous obtenons ainsi, le comportement à grande impulsion :

$$n\left(\mathbf{k}\right) \simeq_{k\to\infty} \frac{m^2 R_\Sigma}{k^4} \tag{5.42}$$

avec le résidu de la self-énergie :

$$R_\Sigma = -\sum_{\mathbf{K}} \int_{\Omega_{\min}}^{\infty} \frac{d\Omega_K}{\pi} b\left(\Omega_K\right) \mathrm{Im}\left[\Gamma\left(\mathbf{K}, \Omega_K + i0^+\right)\right] \tag{5.43}$$

Nous obtenons naturellement la bonne décroissance algébrique à grande impulsion (5.42). Nous constatons également que le paramètre de contact (5.43) dépend du vertex Γ décrivant la collision de 2 fermions dans le milieu. Nous pouvons alors nous demander ce que l'on obtiendrait en considérant la self-énergie exacte. Nous devons alors remplacer dans (5.39), la fonction de Green libre par la fonction de Green exacte, ainsi que le vertex Γ dans l'approximation des échelles par un vertex γ exact. Nous ne connaissons pas l'expression de ces deux fonctions, mais le nouveau γ décrit physiquement la diffusion de deux particules de quatre-impulsions k et $K-k$. Il a les même propriétés physiques que le vertex dans l'approximation des échelles et donne les mêmes contributions exponentielles que ce dernier. La contribution à la décroissance algébrique vient donc ici aussi de la fonction de Green exacte qui, à grande impulsion $\mathbf{k}$ se comporte comme la fonction de Green libre. En effet, l'énergie cinétique du dénominateur domine la self-énergie exacte. Nous obtenons en sommant dans (5.37), le même comportement que (5.42) avec un résidu R_Σ (5.43) obtenu en remplaçant le vertex dans l'approximation des échelles par le vertex à deux corps exact [CAL09].

5.3.3. Énergie d'un gaz en interaction de contact

Pour obtenir l'énergie du gaz en interaction de contact, nous suivons [AGD65, FW71] en utilisant l'expression standard de l'énergie obtenue à partir de la fonction de Green. Nous isolons ensuite la contribution divergente de l'énergie cinétique, ce qui conduit à l'expression :

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{\beta}\sum_k \left[i\omega_{kn} + \mu + \epsilon\left(\mathbf{k}\right)\right] \mathcal{G}\left(k\right) e^{i\omega_{kn}0^+} \\ &= \frac{2}{\beta}\sum_k \epsilon\left(\mathbf{k}\right) \mathcal{G}\left(k\right) e^{i\omega_{kn}0^+} + \frac{1}{\beta}\sum_k \left[i\omega_{kn} + \mu - \epsilon\left(\mathbf{k}\right)\right] \mathcal{G}\left(k\right) e^{i\omega_{kn}0^+} \end{aligned} \tag{5.44}$$

Le premier terme de (5.44) est simplement l'énergie cinétique divergente et le second l'énergie d'interaction qui doit compenser la divergence. Dans ce dernier terme, nous

transformons la sommation sur les fréquences de Matsubara en une intégrale de contour comme usuellement. Nous utilisons alors l'équation de Dyson (1.46) afin de remplacer la fonction de Green. En remarquant que le facteur devant la fonction de Green est simplement l'inverse la fonction de Green libre, nous obtenons pour l'énergie d'interaction :

$$E_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}} \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_k}{2\pi i} f(\omega_k) \left[1 + \Sigma(\mathbf{k}, \omega_k) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_k)\right] \tag{5.45}$$

Le facteur 1 dans l'intégrande de (5.45) est analytique dans le plan complexe et ne donne aucune contribution après intégration sur le contour $\mathcal{C}$. Nous pouvons alors analyser le comportement à grande impulsion de l'intégrande de l'énergie d'interaction. Comme précédemment, la self-énergie est alors négligeable et nous remplaçons la fonction de Green par la fonction de Green libre. Le seul résidu ne donnant pas une contribution exponentiellement décroissante est celui qui contribue à la décroissance algébrique vue précédemment. Nous obtenons ainsi :

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_k}{2\pi i} f(\omega_k) \left[1 + \Sigma(\mathbf{k}, \omega_k) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_k)\right] \simeq_{k\to\infty} -\frac{R_\Sigma}{2\epsilon(\mathbf{k})} \tag{5.46}$$

Nous constatons alors que le comportement divergent de l'énergie cinétique (5.42) est exactement compensé par l'énergie d'interaction (5.46). Nous pouvons alors réécrire l'équation pour l'énergie (5.44) sous la forme :

$$E = 2\sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) \left[n(\mathbf{k}) - \frac{m^2 R_\Sigma}{k^4}\right] + \sum_{\mathbf{k}} \left[\int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_k}{2\pi i} f(\omega_k) \Sigma(\mathbf{k}, \omega_k) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_k) + \frac{R_\Sigma}{2\epsilon(\mathbf{k})}\right] \tag{5.47}$$

Nous obtenons alors l'équivalent de la formule de Tan (5.15) pour l'énergie. Le premier terme de (5.47) est simplement l'énergie cinétique à laquelle on a soustrait son comportement divergent. Quand au second, il devrait être égal à la constante $C/(4\pi m_{\uparrow,\downarrow} a_{\uparrow,\downarrow})$, un résultat hautement non trivial.

5.3.4. Phase superfluide

Dans la phase superfluide, nous devons prendre en compte la self-énergie non diagonale Δ intervenant dans les équations de Dyson (4.28) et (4.29). Pour de grandes impulsions $\mathbf{k}$, nous nous attendons à ce que la self-énergie soit petite et se comporte comme dans la phase normale. Quant à la self-énergie non diagonale, celle-ci doit tendre vers une constante à haute impulsion sans comportement singulier. D'après (4.29), nous développons donc la fonction de Green anormale sous la forme :

$$\mathcal{F}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_{kn}) \simeq_{k\to\infty} -\mathcal{G}_0(-\mathbf{k}, -i\omega_{kn}) \Delta^*(\mathbf{k}, i\omega_{kn}) \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_{kn}) \tag{5.48}$$

En injectant l'expression (5.48) dans l'équation (4.28), nous obtenons le comportement

de la fonction de Green :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_{kn}) \simeq_{k\to\infty} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_{kn}) + [\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_{kn})]^2 \left[\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_{kn}) - \mathcal{G}_0(-\mathbf{k}, -i\omega_{kn}) |\Delta(\mathbf{k}, i\omega_{kn})|^2\right] \quad (5.49)$$

Nous retrouvons dans la fonction de Green (5.49) le comportement de la phase normale qui donne une décroissance algébrique via le pôle de la self-énergie diagonale situé en $\omega_k \simeq -\epsilon(\mathbf{k})$ de résidu R_Σ. Nous avons explicitement un pôle supplémentaire localisé au même endroit grâce à la fonction de Green libre de résidu proportionnel à $|\Delta_\infty|^2 \equiv \lim_{k\to\infty} |\Delta[\mathbf{k}, -\epsilon(\mathbf{k})]|^2$. Le comportement asymptotique de la distribution en impulsion est alors :

$$n(\mathbf{k}) \simeq_{k\to\infty} \frac{m^2\left(R_\Sigma + |\Delta_\infty|^2\right)}{k^4} \quad (5.50)$$

L'expression de l'énergie (5.44) reste la même, le comportement superfluide intervient via la fonction de Green anormale dans les équations de Dyson. En utilisant (4.28), nous obtenons l'énergie d'interaction :

$$E_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}} \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_k}{2\pi i} f(\omega_k) \left[\Sigma(\mathbf{k}, \omega_k)\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_k) + \Delta(\mathbf{k}, i\omega_{kn})\mathcal{F}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_{kn})\right] \quad (5.51)$$

En faisant la même analyse que dans la phase normale, nous montrons que son comportement compense exactement la divergence de l'énergie cinétique à grande impulsion. Nous réécrivons alors l'équation pour l'énergie de la même manière que dans la formule de Tan, cela conduit à :

$$E = 2\sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) \left[n(\mathbf{k}) - \frac{m^2\left(R_\Sigma + |\Delta_\infty|^2\right)}{k^4}\right] + \sum_{\mathbf{k}} \left\{\int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_k}{2\pi i} f(\omega_k) \left[\Sigma(\mathbf{k}, \omega_k)\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_k) + \Delta(\mathbf{k}, i\omega_{kn})\mathcal{F}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_{kn})\right] + \frac{R_\Sigma + |\Delta_\infty|^2}{2\epsilon(\mathbf{k})}\right\} \quad (5.52)$$

Ici aussi, nous obtenons une formule analogue à la formule de Tan. Dans (5.52), la divergence de l'énergie cinétique est compensée par le second terme entre crochet de la première ligne de (5.52). Ici aussi, un terme supplémentaire apparaît. Selon (5.15) qui ne dépend pas de l'état normal ou superfluide, ce dernier paramètre devrait être relié simplement au paramètre de l'interaction à deux corps.

5.4. Résultats numériques

Dans cette section, nous nous intéressons au calcul de l'équation d'état à l'unitarité, dans la phase normale. Nous utilisons l'approximation de la matrice T dont la self-énergie est obtenue en utilisant (5.39) et le vertex d'interaction à deux corps Γ via la formule (4.45). Nous rappelons que nous nous intéressons au cas où deux espèces fermioniques $\uparrow$ et $\downarrow$ sont présentes en quantité égale et dont les fermions ont la même masse.

5.4.1. Unitarité et relation d'échelle

Comme nous l'avons vu dans cette région, l'interaction effective entre fermions est très forte et est caractérisée par la divergence de la longueur de diffusion ($a_{\uparrow,\downarrow} \to \infty$). Nous perdons alors la seule longueur caractéristique du système. Le problème devient alors similaire au cas du gaz sans interaction, il existe une relation d'échelle entre l'énergie et le grand potentiel Ω [Ho04] :

$$E = -\frac{3}{2}\Omega \tag{5.53}$$

Contrairement à l'énergie cinétique qui a un comportement divergent à grande impulsion, il est plus facile de calculer la densité de particules en sommant la fonction de Green sur le quatre-vecteur (1.36). Nous obtenons alors facilement le grand potentiel en intégrant la densité de particule sur le potentiel chimique. Le grand potentiel est nul à haute température, et nous utiliserons donc :

$$\Omega\left(\mu, T\right) = -\int_{-\infty}^{\mu} d\mu' n\left(\mu', T\right) \tag{5.54}$$

5.4.2. Autres formules pour le calcul de l'énergie

Comme nous l'avons vu, nous avons également deux autres formules exactes, celle de Tan (5.15) et celle de la théorie des champs (5.47). Le problème est qu'elles nécessitent la connaissance du comportement asymptotique afin de rendre les intégrales convergentes. Nous allons donc développer la distribution en impulsion en puissance de $1/k^2$ à grand vecteur d'onde. Pour obtenir le comportement algébrique, nous avons vu qu'il nous faut prendre en compte le pôle de la fonction de Green libre dans (5.41). Nous développons alors celle-ci en puissance de $[\omega_k + \epsilon(\mathbf{k}) + \mu]^{-1}$. En effet, comme nous l'avons discuté précédemment, l'intégration est bornée pour les fréquences Ω_K et l'impulsion $\mathbf{K}$. Nous pourrons ainsi réaliser l'intégrale sur ω_k dans (5.37). La fonction de Green libre dans (5.38) nous permettra bien d'obtenir un développement en puissances de $1/k^2$. Nous obtenons ainsi :

$$\Sigma_\Gamma\left(\mathbf{k}, \omega_k\right) = \sum_{p\geq 0} \frac{C_p\left(\mathbf{k}\right)}{\left[\omega_k + \epsilon\left(\mathbf{k}\right) + \mu\right]^{p+1}} \tag{5.55}$$

où les coefficients C_p sont donnés par :

$$C_p(k) = -\sum_{\mathbf{K}} \int_{\Omega_{\min}}^{\infty} \frac{d\Omega_K}{\pi} b(\Omega_K) \operatorname{Im}\left[\Gamma\left(\mathbf{K}, \Omega_K + i0^+\right)\right] \times \left(\frac{\mathbf{k}.\mathbf{K}}{m} + \Omega_K - \epsilon(\mathbf{K}) + 2\mu\right)^p \quad (5.56)$$

Nous obtenons alors le développement de la distribution en impulsion en puissance de $1/k^2$ en injectant les expressions (5.55) et (5.38) dans (5.37). Le comportement algébrique est alors donné par :

$$n(\mathbf{k}) \simeq_{k\to\infty} \sum_p (p+1) \frac{C_p(k)}{(k^2/m)^{p+2}} \quad (5.57)$$

Le comportement de l'énergie d'interaction est obtenu en injectant (5.55) et (5.38) dans (5.45) :

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_k}{2\pi i} f(\omega_k) \left[1 + \Sigma(\mathbf{k}, \omega_k) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_k)\right] \simeq_{k\to\infty} -\sum_p \frac{C_p(k)}{(k^2/m)^{p+1}} \quad (5.58)$$

Nous pouvons alors calculer numériquement les coefficients utiles à la vérification de la convergence et les énergies associées en utilisant les formules (5.15) et (5.47). Nous obtenons alors les résultats représentés sur la figure (5.1) pour l'équation d'état à l'unitarité et dans la phase normale.

Nous constatons que les trois formules pour le calcul de l'énergie donnent des résultats assez proches dans l'approximation de la matrice T. Les trois formules étant exactes, nous devrions obtenir les mêmes résultats si l'on connaissait la self-énergie exactement. Dans les trois cas, nous pouvons étudier le comportement à haute température qui correspond au développement du viriel (voir encadré). Nous constatons que la différence entre le résultat obtenu en intégrant la densité et celui donnée par la formule en théorie des champs est très faible. La différence apparaît seulement pour la formule de Tan près de la transition superfluide, qui dans cette approximation se produit à une température $T_c \simeq 0.243\, T_F$. Dans les expériences récemment réalisées dans le groupe de Salomon à l'ENS, l'équation d'état a été mesurée à l'unitarité en intégrant les profils de densité [NNJ+10]. Nous pouvons alors comparer notre équation d'état aux résultats expérimentaux sur la figure (5.2).

La différence entre la formule de Tan (5.15) est confirmée d'une manière assez dramatique près de la transition superfluide. Le terme constant de (5.15) vaut zéro à l'unitarité ($a_{\uparrow,\downarrow} \to \pm\infty$) et il est clair dans cette approximation, qu'il n'est pas égal à la seconde intégrale de (5.47). Ce terme régularise le comportement de l'énergie près de la transition superfluide. D'un autre côté, la relation d'échelle (5.54) donne des résultats cohérents avec l'expression de théorie des champs (5.47). Nous avons utilisé cette dernière pour des raisons pratiques afin d'obtenir le prolongement de l'équation d'état dans la phase

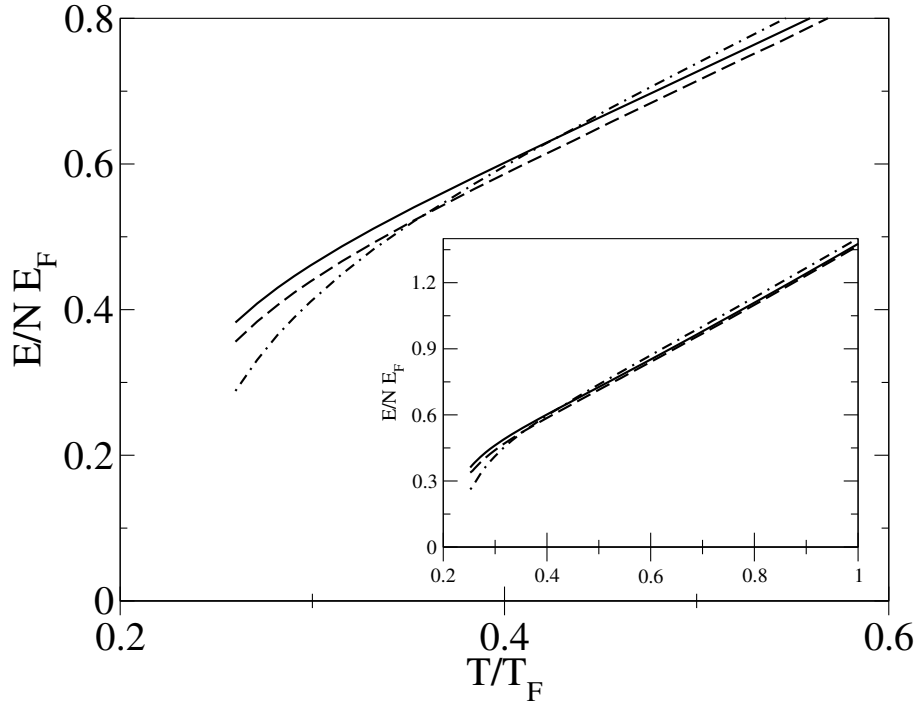


FIGURE 5.1.: Énergie adimensionnée avec l'énergie de Fermi en fonction de la température adimensionnée avec la température de Fermi. Les résultats présentés sont obtenus dans l'approximation de la matrice T dans la phase normale. La transition superfluide se produit dans cette approximation pour $T_c \simeq 0.243\, T_F$. La courbe pleine est obtenue en utilisant (5.54), la courbe en tiret est obtenue via (5.47) et la courbe en tiret et point est obtenue par la formule de Tan (5.15).

superfluide. En utilisant la théorie de Pieri, Pisani et Strinati (4.58), nous obtenons ainsi un accord satisfaisant avec les résultats expérimentaux.

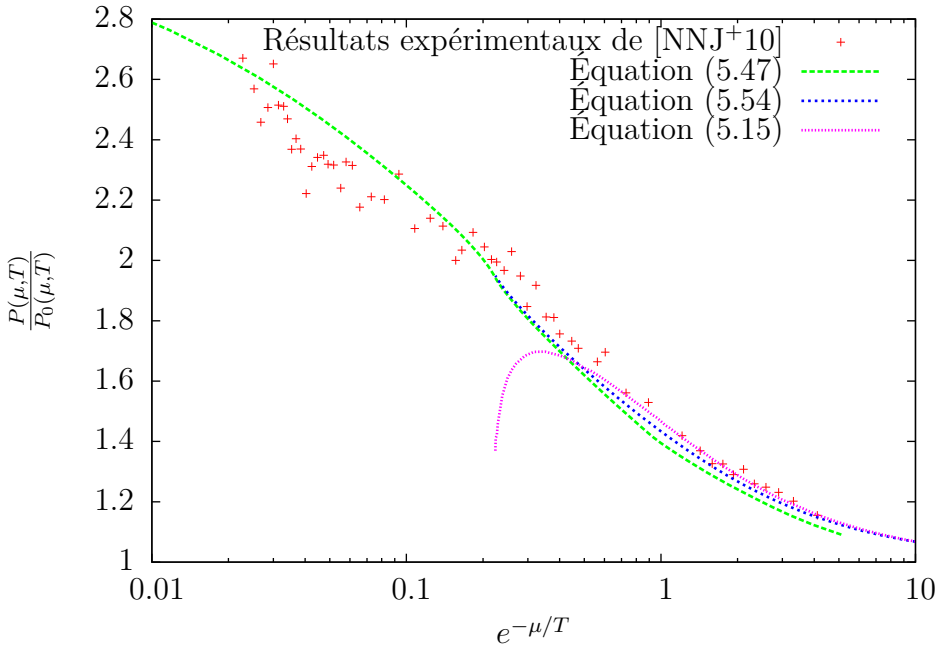


FIGURE 5.2.: Pression adimensionnée avec la pression d'un gaz de fermions libres en fonction de l'inverse de la fugacité. Les résultats sont obtenus dans l'approximation de la matrice T. Les résultats ont été étendus à la phase superfluide en utilisant la théorie de Pieri, Pisani et Strinati pour la formule (5.47).

Chapitre 6

Équation d'état dans la limite BEC

Dans ce chapitre, nous présentons le calcul diagrammatique de l'équation d'état dans la limite BEC, en puissance de la densité [AL10].

6.1. Limite BEC à température nulle

Nous commençons ici par décrire le système dans la limite BEC à température nulle. Nous considérons un gaz de fermions composé de deux espèces $\uparrow$ et $\downarrow$ présentes en quantités différentes. Nous prenons comme convention :

$$n_\uparrow > n_\downarrow \tag{6.1}$$

De plus, la limite BEC est définie par $1/(k_F a_{\uparrow,\downarrow}) \gg 1$. Le vecteur d'onde de Fermi étant relié à la densité à la puissance 1/3, cette région correspond à une limite diluée telle que :

$$n_\uparrow a_{\uparrow,\downarrow}^3 \ll 1 \text{ et } n_\downarrow a_{\uparrow,\downarrow}^3 \ll 1 \tag{6.2}$$

Nous développerons donc l'équation d'état en puissance des densités jusqu'à l'ordre (densité)$^{4/3}$. Sauf mention contraire, nous nous plaçons dans le cas général où les deux espèces ont des masses différentes. Nous avons déjà vu que dans la limite BEC, un état lié à deux corps (une molécule) de très grande énergie de liaison existe. La taille de ces molécules étant donnée par la longueur de diffusion, on s'attend à ce qu'ils se comportent comme des bosons formés de deux fermions. À température nulle, ces bosons composites subissent une condensation de Bose-Einstein et nous avons donc un gaz composé de $n_\downarrow$ bosons composites en interaction avec une mer de Fermi des fermions $\uparrow$ en excès. Nous avons donc un potentiel chimique positif pour l'espèce $\uparrow$ de l'ordre de l'énergie de la mer de Fermi :

$$\mu_\uparrow \simeq \epsilon_F\left(n_\uparrow - n_\downarrow\right) = \frac{k_{F,\uparrow}^2}{2m_\uparrow} > 0 \tag{6.3}$$

où $\epsilon_F(n)$ est l'énergie de Fermi pour une densité n et $n_\uparrow - n_\downarrow = k_{F,\uparrow}^3/(6\pi^2)$. Les $n_\downarrow$ fermions sont appariés avec un $\uparrow$ pour former des bosons composites d'énergie $-|E_b|$. Le potentiel chimique de cette espèce est donc de l'ordre de l'énergie de l'état lié, soit :

$$\mu_\downarrow \simeq -\left|E_B\right| < 0 \tag{6.4}$$

Dans cette limite, l'énergie de l'état lié est très grande, car elle se comporte comme l'inverse de la longueur de diffusion au carré. D'autre part, dans cette limite diluée, l'énergie de la mer de Fermi étant de l'ordre de $(n_\downarrow - n_\downarrow)^{2/3}$, elle est très petite. Nous en déduisons alors que la somme du potentiel chimique des deux espèces est grande et négative. Nos deux petits paramètres sont donc le vecteur d'onde de Fermi de l'espèce majoritaire ainsi que le paramètre d'ordre Δ qui, nous le verrons, est de l'ordre de la racine carrée de la densité des bosons condensés. Dans la prochaine section, nous commençons par montrer les limites de la théorie BCS.

6.2. Théorie BCS

Par souci de simplicité, nous nous limitons dans cette section à l'étude de l'équation d'état dans la limite BEC pour des espèces de masse identique. Nous avons vu dans le chapitre 4 comment obtenir les résultats de la théorie BCS dans le formalisme diagrammatique. Quand les populations des deux espèces sont déséquilibrées, nous avons donc trois équations couplées. En effet, il y a toujours une équation pour le gap mais deux équations distinctes pour chaque densité. En développant l'équation du gap BCS (4.40) en puissance de Δ, nous obtenons à l'ordre le plus bas :

$$\mu_\uparrow + \mu_\downarrow \simeq -\left|E_b\right| < 0 \tag{6.5}$$

où nous avons négligé un terme d'ordre $\mu_\uparrow^{3/2}$ que nous prendrons en compte ultérieurement (voir équation 6.9). Cette expression (6.5) donne simplement que la somme des potentiels chimiques des deux espèces est égale à l'énergie de l'état lié. En partant de la définition de la matrice fonction de Green (4.26), nous pouvons calculer les densités de l'espèce $\uparrow$, respectivement $\downarrow$, en sommant sur la quatre-impulsion la fonction de Green de l'espèce $\uparrow$, respectivement $\downarrow$. En utilisant l'équation (6.5), nous obtenons dans la limite BEC, à l'ordre le plus bas :

$$n_\uparrow - n_\downarrow \simeq \frac{(2m\mu_\uparrow)^{3/2}}{6\pi^2} \tag{6.6}$$

$$n_\downarrow \simeq |\Delta|^2 \frac{m^2 a_{\uparrow,\downarrow}}{8\pi} \tag{6.7}$$

La première équation (6.6) montre que le potentiel chimique de l'espèce majoritaire correspond à l'énergie de Fermi d'un gaz à $n_\uparrow - n_\downarrow$ particules. La seconde équation (6.7) montre que le paramètre d'ordre Δ est proportionnel à la racine carrée de la densité de particules minoritaires. Un tel développement est bien justifié pour des gaz dilués. Nous avons décrit que $n_\downarrow$ particules $\downarrow$ forment un état lié avec le même nombre de particules $\uparrow$. À température nulle, ces bosons composites sont condensés et le paramètre d'ordre $\Delta \sim \sqrt{n_\downarrow}$. Les δn particules $\uparrow$ restantes forment une mer de Fermi.

6.2.1. Équation d'état dans la limite BEC

Nous pouvons aller au delà des résultats de la section précédente en développant les équations BCS à l'ordre suivant en puissance de Δ. Ceci apporte des corrections aux équations (6.6) et (6.7). En inversant les équations, nous obtenons les potentiels chimiques suivants [PS06] :

$$\mu_\uparrow \simeq \epsilon_F(\delta n) + g^{(\mathrm{B})}_{d,\uparrow} n_\downarrow \tag{6.8}$$

$$\mu_B \simeq g^{(\mathrm{B})}_{d,d} n_\downarrow + g^{(\mathrm{B})}_{d,\uparrow} \delta n \tag{6.9}$$

Pour le potentiel chimique de l'espèce majoritaire (6.8), nous obtenons bien une correction à l'énergie de la mer de Fermi à l'ordre 1 en puissance des particules condensées, mais avec une constante de couplage correspondant à l'approximation de Born ($a_{d,\uparrow} = 8/3 a_{\uparrow,\downarrow}$). Nous rappelons que le résultat exact a été obtenu par Skorniakov et Ter-Martirosian [STM57] où $a_{d,\uparrow} \simeq 1.18 a_{\uparrow,\downarrow}$. Pour le potentiel chimique des bosons composites (6.9) défini par (4.49), nous obtenons les corrections à l'ordre 1 en densité du condensat et en densité de la mer de Fermi, où la constante de couplage est, là aussi, donnée dans l'approximation de Born ($a_{d,d} = 2a_{\uparrow,\downarrow}$). Le résultat exact est $a_{d,d} \simeq 0.6 a_{\uparrow,\downarrow}$ et a été obtenu par [PSS04, BKK$^+$06, LG06]. Pour plus de détails sur les longueurs de diffusion dimère-fermion, respectivement dimère-dimère, nous renvoyons le lecteur au chapitre 2, respectivement 3. Pour obtenir l'énergie, nous pouvons alors intégrer le potentiel chimique de l'espèce $\uparrow$ sur le nombre de particules $\uparrow$ variant de $n_\downarrow$ à $n_\uparrow$. Cela revient à rajouter δn particules de l'espèce $\uparrow$ d'énergie $\mu_\uparrow$ à un condensat de $n_\downarrow$ bosons composites. La constante d'intégration est obtenue en dérivant l'énergie calculée par rapport à la densité de bosons composites $n_\downarrow$ et en identifiant le résultat avec (6.9). Nous obtenons :

$$\frac{E}{V} = -|E_b| n_\downarrow + g^{(\mathrm{B})}_{d,d} \frac{n_\downarrow^2}{2} + g^{(\mathrm{B})}_{d,\uparrow} n_\downarrow \delta n + \frac{3}{5} \epsilon_F(\delta n)\, \delta n \tag{6.10}$$

Nous avons vu dans cette section que la théorie BCS dans la limite BEC, décrit un condensat de bosons composites en interaction avec une mer de Fermi des fermions non condensés. Cette approximation ne décrit les interactions que dans l'approximation de Born. Nous allons voir comment obtenir le résultat exact pour l'équation d'état dans le formalisme diagrammatique.

6.3. Formalisme général du développement

Nous avons vu à la section précédente que pour obtenir l'équation d'état dans la théorie BCS, il faut développer les densités en puissance du paramètre d'ordre, celui-ci étant obtenu à partir de l'équation du gap. Nous allons procéder de la même manière mais en prenant en compte les diagrammes au delà du champ moyen. Nous utilisons le formalisme perturbatif, développé au chapitre 4, permettant de calculer la matrice fonction de Green dans la phase superfluide.

6.3.1. Réécriture des équations de Dyson superfluides

Plus spécifiquement nous développons les équations de Dyson dans la phase superfluide (4.28) et (4.29) en puissance de $|\Delta|^2$:

$$\mathcal{G}_\uparrow(k) = \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k) + \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\Sigma_\uparrow(k)\,\mathcal{G}_\uparrow(k) + \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\Delta(k)\,\mathcal{F}^\dagger(k) \tag{6.11}$$

$$\mathcal{F}^\dagger(k) = \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Sigma_\downarrow(-k)\,\mathcal{F}^\dagger(k) - \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Delta^*(k)\,\mathcal{G}_\uparrow(k) \tag{6.12}$$

De par sa définition, la self-énergie $\Sigma_\uparrow(k)$ contient tous les diagrammes qui ne peuvent pas être séparés en deux parties en coupant une ligne de propagateur libre $(k,\uparrow)$ décrite par $\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)$ ou $(-k,\downarrow)$ décrite par $\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)$. Les blocs séparables en coupant une ligne $(-k,\downarrow)$ sont présents dans la fonction de Green via le dernier terme dans l'équation (6.11). En effet, celui-ci décrit la destruction via $\Delta(k)$ d'une paire provenant du condensat dont le fermion $(k,\uparrow)$ en entrée de $\Sigma_\uparrow$. La fonction de Green anormale $\mathcal{F}^\dagger$ créant deux particules, nous avons donc un fermion $(k,\uparrow)$ se propageant en sortie, et une particule $(-k,\downarrow)$ se propageant jusqu'au Δ de droite à gauche (voir figure 4.4). Afin de s'affranchir de ce couplage avec la fonction de Green anormale $\mathcal{F}^\dagger(k)$, nous pouvons cependant réécrire ces équations d'une manière différente. Prenons l'exemple de la propagation d'une particule $(k,\uparrow)$. Pour celle-ci, on définit la self-énergie généralisée $S_\uparrow(k)$ par la somme de tous les diagrammes ayant une ligne $(k,\uparrow)$ en entrée et une ligne $(k,\uparrow)$ en sortie, ne pouvant pas être séparés en deux blocs en coupant une ligne $(k,\uparrow)$. Celle-ci contient donc des diagrammes ayant des lignes $(-k,\downarrow)$ provenant du condensat. On en déduit simplement que la fonction de Green s'écrit :

$$\mathcal{G}_\uparrow(k) = \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k) + \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,S_\uparrow(k)\,\mathcal{G}_\uparrow(k) \tag{6.13}$$

Nous allons alors développer la self-énergie généralisée en puissance du paramètre d'ordre afin d'obtenir le développement de la fonction de Green (6.13). Nous aurons

alors accès aux densités des deux espèces en sommant la fonction de Green normale sur la quatre-impulsion. Nous pouvons également réécrire la deuxième équation de Dyson (6.12) qui devient :

$$\mathcal{F}^{\dagger}(k) = -\mathsf{G}_{\downarrow}(-k)\,\Delta^{*}(k)\,\mathcal{G}_{\uparrow}(k) \tag{6.14}$$

où nous avons introduit une nouvelle fonction de Green "habillée" par la self-énergie diagonale et définie par l'équation (6.15) et représentée diagrammatiquement sur la figure (6.1). Nous la dessinerons par un trait épais plein, respectivement pointillé, pour un fermion $\uparrow$, respectivement $\downarrow$.

$$\mathsf{G}_{\sigma}(k) = \mathcal{G}_{0,\sigma}(k) + \mathcal{G}_{0,\sigma}(k)\,\Sigma_{\sigma}(k)\,\mathsf{G}_{\sigma}(k) \tag{6.15}$$

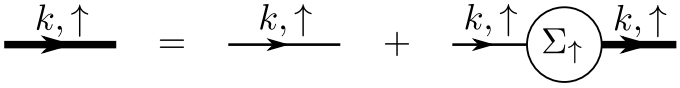


FIGURE 6.1.: Définition diagrammatique de la fonction de Green "habillée" $\mathsf{G}_{\uparrow}(k)$.

Nous rappelons que la self-énergie diagonale ne prend pas en compte les insertions divisibles en coupant une ligne $(-k,\downarrow)$. Comme nous réinjectons cette self-énergie sur un propagateur $(k,\uparrow)$, la fonction de Green "habillée" (6.15) ne prend pas en compte les diagrammes de type $\delta(k)\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\delta^{*}(k)$, où δ, respectivement δ^{*}, sont des blocs de diagrammes décrivant la destruction, respectivement la création de paires. Cependant, ceux-ci sont inclus dans la fonction de Green "complète". On montre facilement que la fonction de Green de l'espèce $\uparrow$ est reliée à la fonction de Green "habillée" par la relation (6.16) et est représentée diagrammatiquement sur la figure (6.2).

$$\mathcal{G}_{\uparrow}(k) = \mathsf{G}_{\uparrow}(k) + \mathsf{G}_{\uparrow}(k)\left[-\Delta(k)\,\mathsf{G}_{\downarrow}(-k)\,\Delta^{*}(k)\right]\mathcal{G}_{\uparrow}(k) \tag{6.16}$$

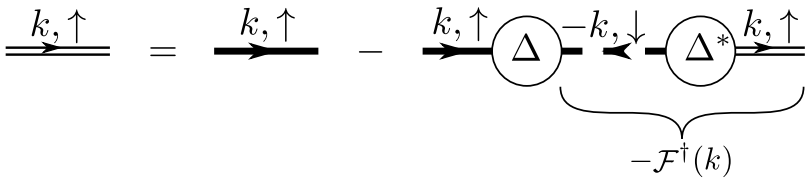


FIGURE 6.2.: Représentation diagrammatique de l'équation (6.16)

On voit clairement sur la figure (6.2) que l'on prend en compte les insertions manquantes dans le développement de la fonction de Green "habillée" en utilisant les self-énergies non diagonales. On retrouve également la nouvelle définition de la fonction de Green anormale (6.14) en sortie du second terme de la fonction de Green (6.16). Il est

à remarquer dans (6.14) que la particule ↓ créée correspond à un propagateur "habillé" alors que la particule ↑ se propage via la fonction de Green "complète". On comprend alors que la fonction de Green "habillée" de l'espèce ↓ permet de ne pas compter deux fois les insertions manquantes dans celle-ci. Nous pouvons alors inverser les équations (6.16) et (6.15) afin d'identifier la fonction de Green généralisée dans (6.13). On en déduit facilement qu'elle s'écrit :

$$S_{\uparrow}(k) = \Sigma_{\uparrow}(k) - \Delta(k)\,\mathsf{G}_{\downarrow}(-k)\,\Delta^{*}(k) \tag{6.17}$$

6.3.2. Développement des fonctions de Green normales

Nous avons vu à la section précédente comment réécrire la fonction de Green dans la phase superfluide afin de ne plus avoir de couplage avec la fonction de Green anormale. Dans le but d'obtenir les densités, il nous reste à évaluer les self-énergies généralisées. Nous avons dans le dernier terme de (6.17) une dépendance explicite en $|\Delta|^2$ mais nous devons également développer les self-énergies diagonales en puissances de $|\Delta|^2$. En nous limitant à l'ordre 2 en puissances de Δ nous pouvons écrire ce développement [1] :

$$S_{\sigma}(k) \simeq S_{\sigma}^{(0)}(k) + |\Delta|^2 S_{\sigma}^{(2)}(k) \tag{6.18}$$

où nous avons introduit deux nouvelles fonctions $S_{\sigma}^{(0)}$ et $S_{\sigma}^{(2)}$. L'exposant donne l'ordre du développement en puissance du paramètre d'ordre. La première fonction ne contient donc pas de paire provenant du condensat, c'est donc la fonction de Green dans l'état normal. La seconde prend en compte l'interaction avec une paire provenant du condensat créée par Δ^* et détruite par Δ. En utilisant (6.17), nous obtenons, pour les particules ↑ :

$$S_{\uparrow}^{(0)}(k) = \Sigma_{\uparrow}^{(0)}(k) \tag{6.19}$$

$$S_{\uparrow}^{(2)}(k) = \Sigma_{\uparrow}^{(2)}(k) - \mathsf{G}_{\downarrow}^{(0)}(-k) \tag{6.20}$$

où l'expression de la fonction de Green "habillée" à l'ordre 0 en puissance du paramètre d'ordre est obtenue en utilisant (6.15). Soit :

$$\mathsf{G}_{\downarrow}^{(0)}(-k) = \left[\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k) - \Sigma_{\downarrow}^{(0)}(-k)\right]^{-1} \tag{6.21}$$

Nous constatons qu'il nous suffit de connaître les expressions des self-énergies diagonales à l'ordre 0 et à l'ordre 2 en puissance du paramètre d'ordre pour avoir accès à la self-énergie généralisée. Nous obtenons le développement de la fonction de Green :

1. Nous verrons par la suite, qu'à l'ordre du développement considéré, Δ est indépendant de la quatre-impulsion k.

$$\mathcal{G}_{\uparrow}^{(0)}(k) = \left[\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k) - S_{\uparrow}^{(0)}(k)\right]^{-1} = \mathsf{G}_{\uparrow}^{(0)}(k) \tag{6.22}$$

$$\mathcal{G}_{\uparrow}^{(2)}(k) = \mathcal{G}_{\uparrow}^{(0)}(k)\, S_{\uparrow}^{(2)}(k)\, \mathcal{G}_{\uparrow}^{(0)}(k) \tag{6.23}$$

6.3.3. Développement des fonctions de Green anormales

Pour obtenir l'équivalent de l'équation du gap BCS, nous allons raisonner sur la fonction de Green anormale $\mathcal{F}$ décrivant la destruction d'une paire. En partant de l'équation de Dyson (4.31) et en injectant l'expression de la fonction de Green "habillée" (6.15), nous obtenons le conjugué de l'équation (6.14) :

$$\mathcal{F}(k) = -\mathsf{G}_{\uparrow}(k)\,\Delta(k)\,\mathcal{G}_{\downarrow}(-k) \tag{6.24}$$

Nous développons l'équation (6.24) de la même façon que la fonction de Green, mais ici, aux ordres 1 et 3 en puissance du paramètre d'ordre. Nous obtenons ainsi :

$$\mathcal{F}^{(1)}(k) = -\mathsf{G}_{\uparrow}^{(0)}(k)\,\Delta^{(1)}(k)\,\mathcal{G}_{\downarrow}^{(0)}(-k) \tag{6.25}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{F}^{(3)}(k) = &-\mathsf{G}_{\uparrow}^{(2)}(k)\,\Delta^{(1)}(k)\,\mathcal{G}_{\downarrow}^{(0)}(-k) - \mathsf{G}_{\uparrow}^{(0)}(k)\,\Delta^{(1)}(k)\,\mathcal{G}_{\downarrow}^{(2)}(-k)\\ &- \mathsf{G}_{\uparrow}^{(0)}(k)\,\Delta^{(3)}(k)\,\mathcal{G}_{\downarrow}^{(0)}(-k)\end{aligned} \tag{6.26}$$

où comme pour l'équation du gap BCS, nous écrirons pour Δ un équation auto-cohérente. $\Delta^{(n)}(k)$ représente la self-énergie non diagonale à l'ordre $\Delta|\Delta|^{2(n-1)}$. Nous avons vu à la section précédente que les fonctions (6.21), (6.22) et (6.23) intervenant dans ce développement sont obtenues par la connaissance des self-énergies diagonales aux ordres 0 et 2 en puissance de Δ. De par leur connaissance, nous avons également accès à la nouvelle fonction intervenant dans (6.26) :

$$\mathsf{G}_{\uparrow}^{(2)}(k) = \mathsf{G}_{\uparrow}^{(0)}(k)\,\Sigma_{\uparrow}^{(2)}(k)\,\mathsf{G}_{\uparrow}^{(0)}(k) \tag{6.27}$$

Nous verrons comment développer l'équation du gap d'une manière auto-cohérente comme dans la théorie BCS et utiliser les équations (6.25) et (6.26) pour éliminer les diagrammes réductibles. Nous allons maintenant présenter les expressions diagrammatiques des self-énergies diagonales contribuant au développement de l'énergie dans la limite BEC.

6.4. Développements diagrammatiques

6.4.1. Ordre le plus bas

Nous rappelons que la self-énergie diagonale est la somme de tous les diagrammes ayant un propagateur $(k,\uparrow)$ en entrée et en sortie, et n'étant pas divisibles en deux morceaux par coupure d'une ligne $(k,\uparrow)$ et $(-k,\downarrow)$. A l'ordre 0 en puissance du paramètre d'ordre nous éliminons en plus tous les diagrammes contenant la création et la destruction de paires via Δ et Δ^*. Tout processus d'interaction avec un fermion $\uparrow$ nécessite au moins une particule $\downarrow$. Le plus simple est alors la collision avec un fermion $\downarrow$ via le vertex T_2 défini à la section (1.4.2). La particule $\downarrow$ ne pouvant être détruite par un Δ^*, nous devons boucler la ligne $(-k,\downarrow)$ sortante sur celle entrante. Le diagramme correspondant est représenté sur la figure (6.3a) et son expression analytique est :

$$\sum_P T_2(P)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(P-k) =_{T=0} \int \frac{d^3P}{(2\pi)^3}\int_{\mathcal{R}_-}\frac{d\omega_P}{2i\pi}T_2(P)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(P-k) \tag{6.28}$$

où nous avons transformé la somme en une intégrale de contour (voir section A.4). Pour effectuer l'intégrale, nous devons donc analyser les singularités ayant une partie réelle négative. Comme le potentiel chimique de l'espèce $\downarrow$ est négatif, en utilisant l'expression de la fonction de Green libre, il est immédiat de constater que celle-ci n'a pas de singularité à partie réelle négative. Quant au vertex T_2, nous pouvons le calculer en sommant les échelles comme à la section 1.4.2. En prenant garde au signe des potentiels chimique, nous obtenons :

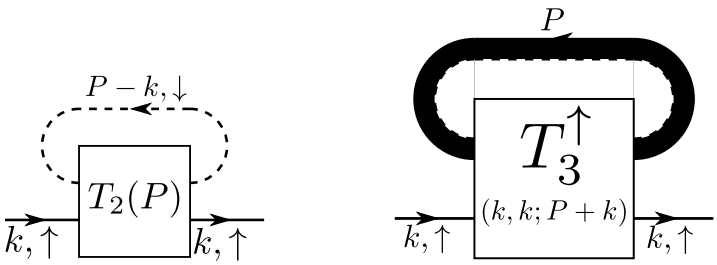
$$T_2^{-1}(P) = \frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{2\pi}\left\{\frac{1}{a_{\uparrow,\downarrow}} - \sqrt{-2m_{\uparrow,\downarrow}\left[i\Omega_P+\mu_\uparrow+\mu_\downarrow-\epsilon_d(\mathbf{P})\right]}\right\} + R(P) \tag{6.29}$$

où nous avons écrit le vertex (6.29) de telle sorte que le premier terme est identique à celui dans le vide (1.58) où la fréquence $i\Omega_P \to i\Omega_P+\mu_\downarrow+\mu_\downarrow$. Le second terme est dû à la mer de Fermi de l'espèce $\uparrow$ et est donné par :

$$R(P) = \int_{q<k_0}\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{i\Omega_P+\mu_\uparrow+\mu_\downarrow-\epsilon_\uparrow(\mathbf{q})-\epsilon_\downarrow(\mathbf{P}-\mathbf{q})} \tag{6.30}$$

où $k_0=\sqrt{2m_\uparrow\mu_\uparrow}$ est petit à faible densité. La somme du potentiel chimique des deux espèces étant négative, nous constatons facilement dans les expressions (6.29) et (6.30) que les singularités ont une partie réelle positive. Nous en déduisons que le diagramme (6.3a) associé à l'équation (6.28) est nul.

On peut alors considérer un diagramme d'ordre supérieur comprenant toujours au moins une ligne de fermion $\downarrow$ afin d'avoir une interaction. Prenons par exemple celui de la figure (6.3b) qui décrit l'interaction entre un fermion $\uparrow$ et un dimère composite via le vertex T_3 (voir chapitre 2). Comme nous ne considérons pas, dans cette section, la destruction de paires nous devons boucler le dimère sur lui même.



(a) Processus le plus simple contribuant à $\Sigma_{\uparrow}^{(0)}$

(b) Processus à trois particules contribuant à $\Sigma_{\uparrow}^{(0)}$

FIGURE 6.3.: Diagrammes contribuant à $\Sigma_{\uparrow}^{(0)}$.

Le diagramme (6.3b) a pour expression analytique :

$$\sum_{P} T_3^{\uparrow}\left(k,k;k+P\right) T_2\left(P\right) \tag{6.31}$$

Pour les mêmes raisons que précédemment, la sommation sur les fréquences montre que le vertex T_2 ne donne aucune contribution, à cause de ses singularités à partie réelle positive. On peut alors revenir à la définition du vertex $T_3^{\uparrow}$ afin d'étudier ses propriétés analytiques. On montre facilement que pour celui-ci aussi, les singularités ont une partie réelle positive. Nous renvoyons à la lecture de l'appendice C de [CL08] pour plus de détails. Nous en déduisons que le diagramme (6.3b) associé à l'équation (6.31) vaut 0.

À température nulle, tous les fermions $\downarrow$ sont condensés et il n'y a pas de mer de Fermi pour cette espèce. On peut montrer, en toute généralité [CL08], que tous les diagrammes comprenant un propagateur $\downarrow$ de droite à gauche sont nuls. Comme dans le calcul de la self-énergie de l'espèce $\uparrow$ à l'ordre 0 en puissance du paramètre d'ordre, ce type de ligne est nécessaire afin d'avoir une interaction. On en déduit que :

$$\Sigma_{\uparrow}^{(0)}\left(k\right) = 0 \tag{6.32}$$

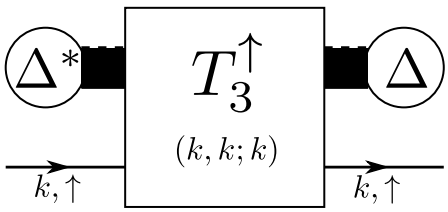
Concernant la self-énergie de l'espèce $\downarrow$, nous devons regarder cette fois-ci l'interaction avec une ligne fermionique $\uparrow$. Contrairement au cas précédent, il existe une mer de Fermi de cette espèce et nous pouvons boucler une ligne fermionique $\uparrow$. En inversant les lignes $\uparrow$ et $\downarrow$ dans le diagramme (6.3a), nous obtenons l'expression suivante :

$$\Sigma_{\downarrow}^{(0)}\left(k\right) = \sum_{P} T_2\left(P\right) \mathcal{G}_{0,\uparrow}\left(P-k\right) \tag{6.33}$$

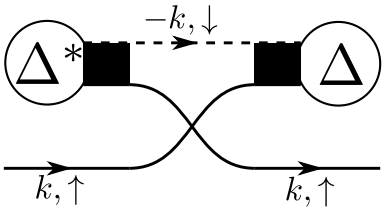
Nous pourrions considérer des diagrammes d'ordre supérieur impliquant une ligne supplémentaire de l'espèce $\uparrow$ mais en pratique, ceux-ci ne jouent aucun rôle à l'ordre de développement qui nous intéresse.

6.4.2. Ordre en densité

Dans cette section, nous présentons le calcul de la self-énergie diagonale à l'ordre 2 en puissance du paramètre d'ordre, c'est-à-dire, à l'ordre 1 en puissance de la densité de particules condensées. Comparé à ce que nous avons fait précédemment, nous devons écrire tous les diagrammes interagissant avec une paire créée par Δ^* puis détruite avec Δ. Pour la self-énergie de l'espèce $\uparrow$, le processus le plus simple est donc l'interaction d'un dimère composite avec un fermion $\uparrow$. C'est le processus $T_3^{\uparrow}$ que nous avons déjà étudié au chapitre 2. Nous avons représenté la self-énergie à cet ordre sur la figure (6.4a).



(a) Processus le plus simple contribuant à $\Sigma_{\uparrow}^{(2)}$



(b) Processus à trois particules ne contribuant pas à $\Sigma_{\uparrow}^{(2)}$ (terme de Born)

FIGURE 6.4.: Diagrammes contribuant à $\Sigma_{\uparrow}^{(2)}$.

Il nous faut remarquer en écrivant le premier terme de ce vertex dans l'approximation de Born (6.4b) qu'il est divisible en deux blocs par coupure de la ligne fermionique $(-k, \downarrow)$. Nous devons donc soustraire ce diagramme au vertex $T_3^{\uparrow}$ afin d'obtenir la self-énergie. En prenant en compte ces deux diagrammes, nous obtenons :

$$\Sigma_{\uparrow}^{(2)}(k) \simeq T_3^{\uparrow}(k, k; k) + \mathcal{G}_{0,\downarrow}(k) \tag{6.34}$$

Nous pouvons également considérer des diagrammes d'ordre supérieur. Par exemple en bouclant une ligne fermionique $\uparrow$ comme représenté sur la figure (6.5).

Nous présenterons dans la suite le calcul du premier terme contribuant à ce bloc qui a une importance dans le calcul de l'équation d'état. Par contre les termes d'ordre supérieur sont négligeables dans le calcul à l'ordre qui nous intéresse [AL10]. Ici aussi, nous devons soustraire les termes divisibles en deux blocs par coupure d'une ligne fermionique. Comme usuellement, ceux-ci sont obtenus en remplaçant les vertex $T_3^{\uparrow}$ par ce même vertex dans l'approximation de Born. Pour exemple, nous l'avons représenté sur la figure (6.6). Il est à noter pour le bloc (6.5) que les termes ayant au moins trois vertex $T_3^{\uparrow}$ ne comprennent aucun terme indivisible.

Au final, nous obtenons l'expression suivante pour la self-énergie diagonale à l'ordre 2 en puissance du paramètre d'ordre :

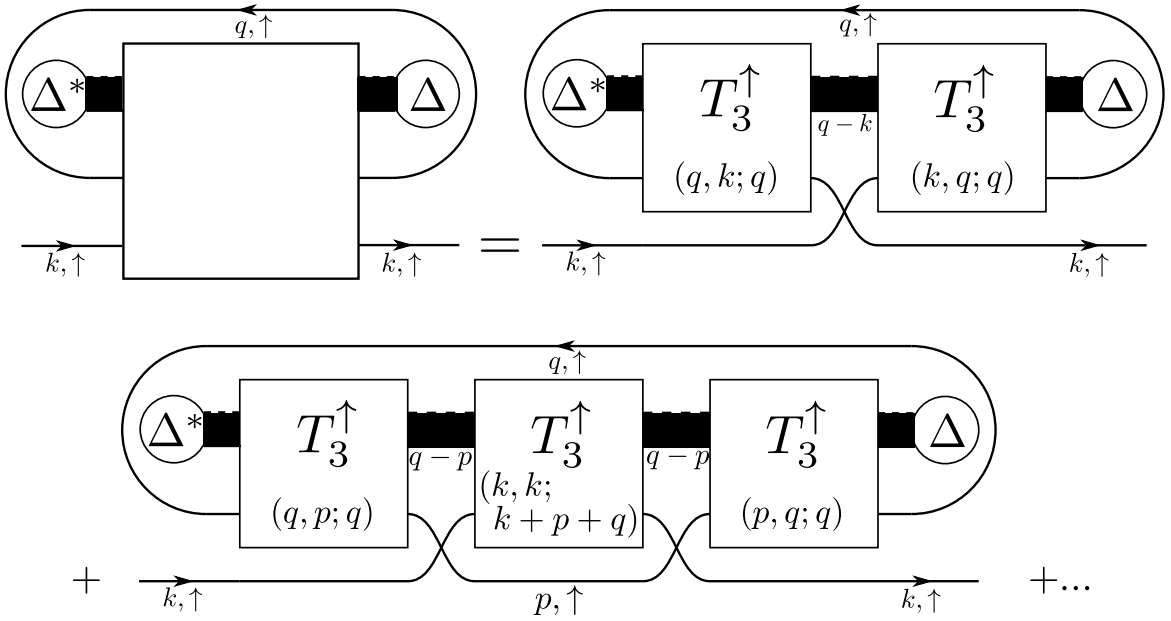


FIGURE 6.5.: Diagramme d'ordre supérieur contribuant à $\Sigma_{\uparrow}^{(2)}$.

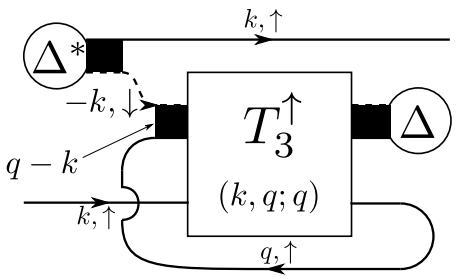


FIGURE 6.6.: Diagramme divisible n'appartenant pas à $\Sigma_{\uparrow}^{(2)}$.

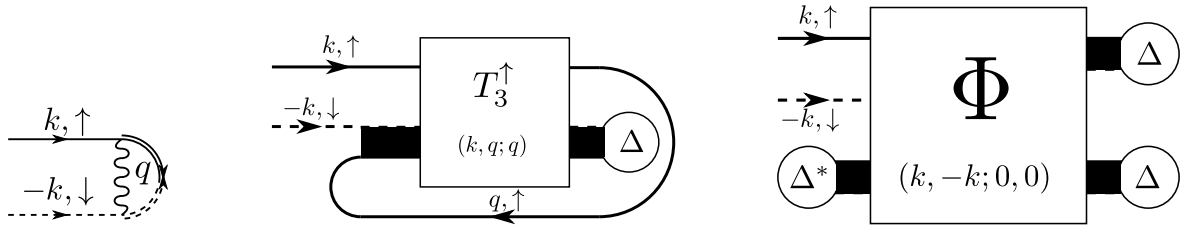
$$\Sigma_{\uparrow}^{(2)}(k) \simeq T_3^{\uparrow}(k,k;k) + \sum_q T_3^{\uparrow}(q,k;q)\, T_2(q-k)\, T_3^{\uparrow}(k,q;q)\, \mathcal{G}_{0,\uparrow}(q) + \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\left\{1 + \sum_q T_3^{\uparrow}(q,k;q)\, T_2(q-k)\, \mathcal{G}_{0,\uparrow}(q)\right\} \quad (6.35)$$

Concernant la self-énergie diagonale de l'espèce ↓, nous pouvons l'obtenir simplement en inversant les lignes fermioniques ↑ et ↓ dans les diagrammes précédents. Mais il faut remarquer sur la figure (6.5) que la boucle est alors effectuée via une ligne fermionique de l'espèce ↓, ce qui est impossible à température nulle. Nous obtenons alors simplement :

$$\Sigma_{\downarrow}^{(2)}(k) = T_3^{\downarrow}(k,k;k) + \mathcal{G}_{0,\uparrow}(-k) \quad (6.36)$$

6.4.3. Équation du gap

Nous avons vu que, dans la théorie BCS, la self-énergie non diagonale est calculée par une équation auto-cohérente. Cette self-énergie est la somme de tous les diagrammes ayant en entrée deux lignes fermioniques $(k,\uparrow)$ et $(-k,\downarrow)$. Ceux-ci doivent également être indivisible en coupant une de ces deux lignes. Le diagramme le plus simple est donc celui de la théorie BCS qui, par l'équation auto-cohérente prend en compte toutes les interactions possibles entre les deux lignes fermioniques entrantes. Ce processus est représenté sur la figure (6.7a).



(a) Théorie BCS. (b) Diagramme d'ordre Δ. (c) Diagramme d'ordre $\Delta|\Delta|^2$.

FIGURE 6.7.: Self-énergie non diagonale.

Dans les autres diagrammes à prendre en compte ces deux lignes ne doivent donc pas interagir en premier. Si nous nous limitons aux diagrammes avec [2] un unique Δ, nous pouvons alors rajouter une troisième ligne de l'espèce $\uparrow$ qui doit nécessairement se refermer en entrée (notons comme précédemment qu'en rajoutant une ligne $\downarrow$, celle-ci donne une contribution nulle). Ce processus à trois corps fait donc intervenir un $T_3^{\uparrow}$ et une ligne bouclée de la sortie à l'entrée du bloc. Le diagramme correspondant est représenté sur la figure (6.7b). Il est à noter que comme pour les cas précédents, le terme de Born du $T_3^{\uparrow}$ fournit un diagramme divisible que nous ne devons pas considérer. Afin d'obtenir un développement à l'ordre suivant en puissance du paramètre d'ordre, nous devons donc considérer ici un développement à l'ordre 3 en Δ. Celui-ci détruit donc deux dimères via Δ et en créé un via Δ^*. Comme en entrée du bloc nous avons deux lignes fermioniques ne devant pas interagir, nous obtenons donc le vertex Φ introduit au chapitre 3. Le diagramme correspondant est représenté sur la figure (6.7c). Les contributions précédentes s'écrivent analytiquement :

$$\Delta_{\mathrm{BCS}} + \Delta \sum_{q} T_2\left(q-k\right) T_3^{\uparrow}\left(k,q;q\right) \mathcal{G}_{0,\uparrow}\left(q\right) + \frac{1}{2}\Delta\left|\Delta\right|^2 \Phi\left(k,-k;0,0\right) \tag{6.37}$$

Dans ces diagrammes, nous avons également des contributions réductibles que nous devons soustraire. Elles sont obtenues en remplaçant les vertex à trois particules par leur terme de Born. Par exemple, dans le diagramme (6.7b), le terme de Born du $T_3^{\uparrow}$ échange les deux fermions $\uparrow$. Le fermion $(k,\uparrow)$ incident va directement dans Δ et donc le fermion $\downarrow$ qui forme avec lui la paire détruite a nécessairement une impulsion $(-k,\downarrow)$.

2. $\Delta(k)$ est remplacé par Δ "à la BCS" (indépendant de k) à l'ordre considéré.

C'est donc bien un diagramme divisible en coupant cette ligne. Nous pouvons nous rendre ainsi compte que ce terme est relié aux self-énergies diagonales développées à la section précédente. Nous pouvons effectuer le même raisonnement pour le terme de la figure (6.7c) et nous obtenons les contributions réductibles à soustraire qui s'écrivent :

$$-\Delta\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Sigma_{\downarrow}^{(0)}(-k)-\Delta\left|\Delta\right|^{2}\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Sigma_{\downarrow}^{(2)}(-k)-\Delta\left|\Delta\right|^{2}\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\Sigma_{\uparrow}^{(2)}(k)$$
$$+\Delta\left|\Delta\right|^{2}\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k) \quad (6.38)$$

Il faut noter que pour obtenir cette expression des diagrammes divisibles en fonction de la self-énergie diagonale (6.38), nous avons négligé un type de diagramme. En effet, dans $\Sigma_{\uparrow}^{(2)}$, les termes représentés sur les figures (6.5) et (6.6) ne sont pas pris en compte dans le calcul de Δ (6.37). Nous devrions considérer un bloc supplémentaire dont une partie de la contribution divisible est représentée sur la figure (6.8).

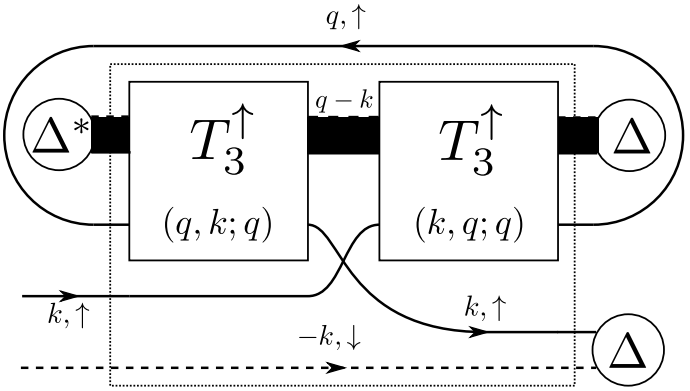


FIGURE 6.8.: Diagramme divisible ne contribuant pas à Δ à l'ordre 3 du développement.

Ce diagramme appartient à un bloc faisant intervenir l'interaction entre cinq particules dont une est bouclée depuis la sortie jusqu'à l'entrée et si nous le considérions dans le calcul de Δ, la contribution divisible serait bien reliée aux self-énergies diagonales par la relation (6.38). En pratique, le calcul d'un tel diagramme dans $\Delta(k)$ est d'un ordre supérieur au développement qui nous intéresse. Nous le négligeons donc à partir de maintenant.

Afin d'éliminer les contributions divisibles, nous revenons à la fonction de Green anormale $\mathcal{F}$. Nous développons l'équation (6.24) en puissances du paramètre d'ordre et des self-énergies diagonales (dans la limite diluée $\Sigma\to 0$). On obtient alors au premier ordre en puissances des self-énergies diagonales et à l'ordre 3 en puissances du paramètre d'ordre :

$$\mathcal{F}(k)\simeq-\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Delta\Big\{1+\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Sigma_{\downarrow}^{(0)}(-k)$$
$$+\left|\Delta\right|^{2}\left[\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\Sigma_{\uparrow}^{(2)}(k)+\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Sigma_{\downarrow}^{(2)}(-k)-\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\right]\Big\} \quad (6.39)$$

Nous constatons alors que la partie entre accolades est exactement la somme des diagrammes divisibles (6.38). Nous sommons alors les contributions contribuant à la self-énergie non diagonale (6.37) et (6.38) et nous remplaçons cette dernière contribution dans l'équation de la fonction de Green anormale afin d'éliminer les diagrammes divisibles. Nous obtenons :

$$\mathcal{F}(k) \simeq \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Delta_{\mathrm{BCS}} + \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Delta\left[\sum_q T_2(q-k)\,T_3^{\uparrow}(k,q;q)\,\mathcal{G}_{0,\uparrow}(q) + \frac{1}{2}|\Delta|^2\,\Phi(k,-k;0,0)\right] \quad (6.40)$$

Nous notons $\mathcal{F}'(k)$ le deuxième terme du membre de droite de (6.40). Ce terme représente la fonction de Green anormale avec les diagrammes divisibles mais où les deux lignes fermioniques entrantes ne peuvent pas interagir en premier. Afin d'éliminer la fonction de Green anormale, nous calculons le gap BCS défini par (4.33), ce qui conduit à :

$$\Delta_{\mathrm{BCS}}\left[g^{-1} - \sum_k \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\right] = \sum_k \mathcal{F}'(k) \quad (6.41)$$

On reconnaît entre les crochets l'expression de l'inverse du vertex T_2 (6.29) à quatre-impulsion nulle. On en déduit finalement l'équation du gap généralisée en considérant $\Delta_{\mathrm{BCS}} \simeq \Delta$ soit :

$$T_2^{-1}(0) = \sum_k \frac{\mathcal{F}'(k)}{\Delta} \quad (6.42)$$

avec

$$\frac{\mathcal{F}'(k)}{\Delta} = \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\left[\sum_q T_2(q-k)\,T_3^{\uparrow}(k,q;q)\,\mathcal{G}_{0,\uparrow}(q) + \frac{1}{2}|\Delta|^2\,\Phi(k,-k;0,0)\right] \quad (6.43)$$

6.5. Résultats analytiques

6.5.1. Densité de l'espèce ↑

Nous commençons par calculer la densité de l'espèce ↑ en sommant sa fonction de Green normale sur la quatre-impulsion. En utilisant (6.32) et (6.19), nous déduisons immédiatement qu'à l'ordre 0 en puissance du paramètre d'ordre, la self-énergie généralisée de l'espèce ↑ est nulle :

$$S_{\uparrow}^{(0)}(k) = 0 \tag{6.44}$$

Concernant cette self-énergie à l'ordre 2 en Δ (6.20), nous développons l'expression de la fonction de Green "habillée" (6.21) à l'ordre le plus bas en puissance de la self-énergie et en injectant l'expression (6.35), nous obtenons ainsi :

$$\begin{aligned} S_{\uparrow}^{(2)}(k) = T_3^{\uparrow}(k,k;k) + \sum_q T_3^{\uparrow}(q,k;q)\, T_2(q-k)\, T_3^{\uparrow}(k,q;q)\, \mathcal{G}_{0,\uparrow}(q) \\ + \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k) \sum_q T_2(q-k)\, \mathcal{G}_{0,\uparrow}(q) \left[T_3^{\uparrow}(k,q;q) + \mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k) \right] \end{aligned} \tag{6.45}$$

Nous constatons que le terme de Born du $T_3^{\uparrow}(k,k;k)$ divisible en coupant $(-k,\downarrow)$ que nous avons enlevé à la self-énergie (6.34) est compensé par le développement de la fonction de Green "habillée" à l'ordre le plus bas. Dans le dernier terme du membre de droite de (6.45), nous voyons que le dernier terme entre crochets compense seulement le terme de Born du vertex $T_3(k,q;q)$ (premier terme entre crochets). Ceci est dû au fait que nous développons la fonction de Green "habillée" en puissance de la self-énergie. Si nous prenions en compte la fonction de Green "habillée" complète, le terme entre crochet serait égal à zéro, car celui-ci correspond au diagramme de la self-énergie (6.45) réductible en coupant une ligne $(-k,\downarrow)$ que nous avons soustrait pour Σ mais qui appartiennent à S. Nous devons donc ne pas prendre en compte le troisième terme du membre de droite dans (6.45). Au final, nous obtenons :

$$S_{\uparrow}^{(2)}(k) = T_3^{\uparrow}(k,k;k) + \sum_q T_3^{\uparrow}(q,k;q)\, T_2(q-k)\, T_3^{\uparrow}(k,q;q)\, \mathcal{G}_{0,\uparrow}(q) \tag{6.46}$$

Pour obtenir la densité, nous devons alors sommer la fonction de Green normale que nous développons à l'ordre le plus bas en puissance de la self-énergie généralisée. Nous obtenons ainsi :

$$n_{\uparrow} = \sum_k \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k) + \sum_k \left[\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\right]^2 S_{\uparrow}^{(2)}(k) \tag{6.47}$$

Le premier terme de (6.47) est simplement le nombre de particules de la mer de Fermi sans interaction. Après une simple intégration, nous obtenons :

$$n_{\uparrow}^{(0)} = \frac{k_0^3}{6\pi^2} \tag{6.48}$$

Les termes d'ordre supérieur nécessitent plus d'effort.

Premier terme d'ordre $|\Delta|^2$

La self-énergie généralisée (6.46) contient deux termes, nous notons le premier d'un exposant $(2a)$, le second d'un exposant $(2b)$. Concernant le premier, nous commençons par effectuer la sommation sur les fréquences :

$$n_{\uparrow}^{(2a)}(\mathbf{k}) = \beta^{-1} \sum_{n} \left[\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\right]^2 T_3^{\uparrow}(k,k;k) \tag{6.49}$$

Pour réaliser la sommation sur les fréquences de Matsubara dans (6.49), nous pouvons utiliser la méthode usuelle, mais nous devons faire attention à la fonction de Green libre au carré. En effet, celle-ci a un pôle d'ordre 2 qui implique par utilisation du théorème des résidus de dériver le $T_3^{\uparrow}$ mais également la distribution de Fermi-Dirac. Nous pourrons ensuite prendre la limite de température nulle. Au final, nous obtenons trois termes :

$$n_{\uparrow}^{(2a)}(\mathbf{k}) = -\delta\left[\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) - \mu_{\uparrow}\right] T_3^{\uparrow}\left(\overline{k},\overline{k};\overline{k}\right) + \theta\left(k_0 - |\mathbf{k}|\right) \left.\frac{\partial T_3^{\uparrow}(k,k;k)}{\partial \omega_k}\right|_{k=\overline{k}} + \frac{1}{\left[\epsilon_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{k}) - \mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}\right]^2} \tag{6.50}$$

où $\overline{k}$ est l'équivalent de la quatre-impulsion "on the shell" dans le vide, mais avec un potentiel chimique non nul, c'est-à-dire $\overline{k} = \{\mathbf{k}, \epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) - \mu_{\uparrow}\}$. Le premier terme de (6.50) est facilement intégré sur le vecteur d'onde et donne :

$$n_{\uparrow}^{(2a1)} = -\frac{m_{\uparrow} k_0}{2\pi^2} T_3^{\uparrow}\left(\overline{k_0},\overline{k_0};\overline{k_0}\right) \tag{6.51}$$

où $\overline{k_0} = \{\mathbf{k_0}, 0\}$. L'idée est alors de déterminer à l'ordre le plus bas la différence entre le vertex $T_3^{\uparrow}$ de l'équation (6.51) et celui dans le vide à impulsion nulle relié à la longueur de diffusion par (2.3). Nous écrivons cette différence sous la forme :

$$T_3^{\uparrow}(k,k;k) = T_{3,v}^{\uparrow}(0,0;\{\mathbf{0},-|E_b|\}) + \left[T_3^{\uparrow}(k,k;k) - T_{3,v}^{\uparrow}(k,k;k)\right] + \left[T_{3,v}^{\uparrow}(k,k;k) - T_{3,v}^{\uparrow}(0,0;\{\mathbf{0},-|E_b|\})\right] \tag{6.52}$$

Dans l'équation (6.52), le vertex $T_{3,v}^{\uparrow}$ désignent le vertex à trois particules dans le vide du chapitre 2. Celui-ci est obtenu en remplaçant, dans celui que nous cherchons à calculer (6.52), les potentiels chimiques $\mu_{\uparrow} \to 0$ et $\mu_{\downarrow} \to -|E_b|$. D'après la relation (2.3), le premier terme du membre de droite vaut simplement $g_{d,\uparrow} Z^{-1}$. Il nous reste alors deux différences à calculer. Dans la première, nous cherchons donc un développement en puissance du potentiel chimique alors que dans la seconde, nous cherchons un développement en puissance du vecteur d'onde. Nous rappelons que dans la limite de faible densité, le vecteur d'onde k_0 est petit devant l'inverse de la longueur de diffusion fermion-fermion. Nous commençons par développer diagrammatiquement le vertex $T_3^{\uparrow}$ représenté sur la

figure (6.9).

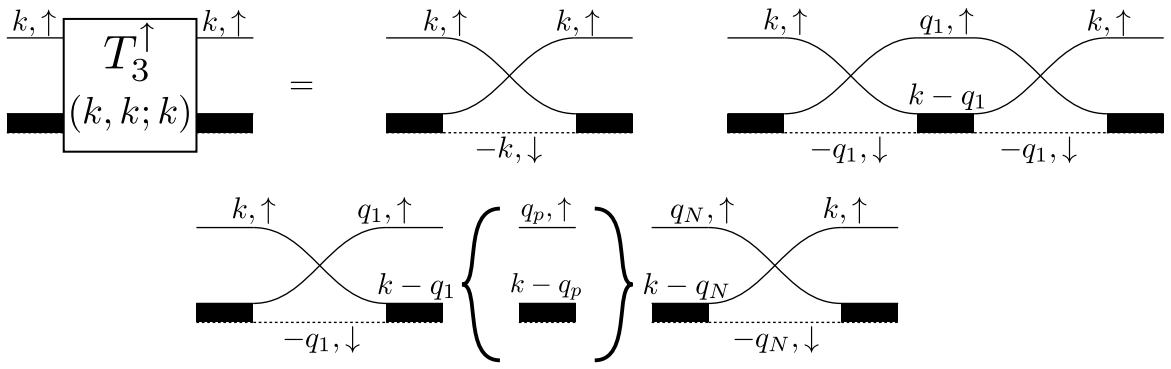


FIGURE 6.9.: Développement diagrammatique de $T_3^{\uparrow}(k,k;k)$.

Pour le second terme de (6.52), les quatre-impulsions k sont inchangées, seul les potentiels chimiques changent via les fonctions de Green libres et le vertex T_2. On écrit ces différences comme $\Delta T_2(P) = T_2(P) - T_{2,v}(P)$ et $\Delta\mathcal{G}_{0,\sigma}(k) = \mathcal{G}_{0,\sigma}(k) - \mathcal{G}_{0,\sigma,v}(k)$ où ici aussi, l'indice v représente la fonction dans le vide. Nous développons alors la différence des vertex $T_3^{\uparrow}$ en puissance de $\Delta\mathcal{G}_{0,\sigma}$ et ΔT_2. Le terme comprenant N dimères de la figure (6.9) comprend également N fois $\mathcal{G}_{0,\uparrow}$. Le terme d'ordre $\Delta\mathcal{G}_{0,\uparrow}(q_p)$ est, à l'ordre le plus bas, multiplié par $T_{2,v}(k-q_p)$, à gauche par tous les diagrammes de $T_{3,v}^{\uparrow}(k,q_p;k)$ et à droite par $T_{3,v}^{\uparrow}(q_p,k;k)$. Nous obtenons également un terme d'ordre ΔT_2 multiplié cette fois-ci par $\mathcal{G}_{0,\uparrow,v}(q_p)$ et par les mêmes $T_{3,v}$ à gauche et à droite. Ceci toujours à l'ordre le plus bas. Il reste à sommer sur le quatre-vecteur q_p, la différence vaut alors à cet ordre :

$$T_3^{\uparrow}(k,k;k) - T_{3,v}^{\uparrow}(k,k;k) = \sum_q T_{3,v}^{\uparrow}(k,q;k)\left[\Delta T_2(k-q)\,\mathcal{G}_{0,\uparrow,v}(q) + T_{2,v}(k-q)\,\Delta\mathcal{G}_{0,\uparrow}(q)\right] T_{3,v}^{\uparrow}(q,k;k) \quad (6.53)$$

Nous devons remarquer que nous avons négligé un terme d'ordre $\Delta\mathcal{G}_{0,\downarrow}$. En effet, le potentiel chimique de cet espèce est égal à l'énergie de l'état lié qui est grande et négative. En comparant celle-ci à l'énergie cinétique qui est petite, nous pouvons alors voir que le dénominateur de cette fonction de Green ne comporte pas de petit dénominateur et sa contribution est négligeable. Nous pouvons aussi voir après calcul que la contribution venant de ΔT_2 est d'un ordre supérieur à celle provenant de $\Delta\mathcal{G}_{0,\uparrow}$. Nous négligeons dès maintenant cette contribution. Pour plus de détails nous renvoyons à la lecture de l'annexe A de [AL10]. Au final, il nous reste seulement à évaluer le second terme de (6.53). La sommation sur les fréquences se transforme à température nulle en une intégrale le long de l'axe imaginaire. En étudiant les propriétés analytiques en fonction de la fréquence, nous constatons que seul $\Delta\mathcal{G}_{0,\uparrow}$ a un pôle à partie réelle négative. En déformant le contour dans ce demi-plan, nous obtenons ainsi :

$$T_3^{\uparrow}(k,k;k) - T_{3,v}^{\uparrow}(k,k;k) \simeq \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left\{ \left[T_{3,v}^{\uparrow}(k,q;k)\right]^2 T_{2,v}(k-q)\,\theta(|\mathbf{q}|-k_0) - \left[T_{3,v}^{\uparrow}(k,q;k)\right]^2 T_{2,v}(k-q) \right\} \quad (6.54)$$

où dans le premier terme entre accolades $q = \{\mathbf{q}, \epsilon_{\uparrow}(\mathbf{q}) - \mu_{\uparrow}\}$, et dans le second $q = \{\mathbf{q}, \epsilon_{\uparrow}(\mathbf{q})\}$. Nous avons également utilisé la propriété $T_{3,v}^{\uparrow}(k,q;k) = T_{3,v}^{\uparrow}(q,k;k)$. Nous pouvons alors comprendre que la contribution principale de l'intégrale vient des vecteurs d'onde dont le module est bien plus petit que l'inverse de la longueur de diffusion. Pour de hautes énergies, le potentiel chimique est négligeable et la différence dans l'intégrande tend vers zéro rapidement. A l'ordre le plus bas, nous remplaçons alors le vertex $T_{3,v}^{\uparrow}$ par sa valeur à basse énergie, c'est la constante de couplage dimère-fermion exacte. D'autre part le vertex $T_{2,v}$ se comporte à basse énergie comme un propagateur bosonique (1.62). Nous obtenons finalement à l'ordre le plus bas :

$$T_3^{\uparrow}(k,k;k) - T_{3,v}^{\uparrow}(k,k;k) = g_{d,\uparrow}^2 Z^{-1} \times \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[\frac{\theta(|\mathbf{q}|-k_0)}{\frac{(\mathbf{k}^2-\mathbf{q}^2)}{2m_{\uparrow}} - \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}{2m_d}} - \frac{1}{\frac{\left(\mathbf{k}^2-k_0^2-\mathbf{q}^2\right)}{2m_{\uparrow}} - \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}{2m_d}} \right] + o\left(k_0^{3/2}\right) \quad (6.55)$$

Nous pouvons alors procéder d'une manière similaire pour la deuxième différence de l'équation (6.52) mais en introduisant cette fois-ci $\Delta T_2(k-q_p) = T_{2,v}(k-q_p) - T_{2,v}(-q_p)$. Nous remarquons sur la figure (6.9) que la fonction de Green libre de l'espèce $\uparrow$ ne dépend pas de la quatre-impulsion k. Pour les mêmes raisons que précédemment, nous montrons que les termes en $\Delta\mathcal{G}_{0,\downarrow}$ sont d'ordre supérieur, et que la contribution principale de l'intégrale du terme en ΔT_2 vient des vecteurs d'onde à basse énergie. À l'ordre le plus bas du développement, nous éliminons alors le vertex $T_3^{\uparrow}$ en faveur de la constante de couplage et le vertex T_2 par un propagateur bosonique. Nous obtenons un terme du même ordre que (6.55). La densité (6.51) est finalement donnée à l'ordre qui nous intéresse par :

$$n_{\uparrow}^{(2a1)} = -\frac{m_{\uparrow}k_0}{2\pi^2} g_{d,\uparrow} Z^{-1} (1 + k_0 a_{d,\uparrow} C_{a,1}) \quad (6.56)$$

où la constante $C_{a,1}$ est donnée dans l'article [AL10]. Le calcul de la contribution de la dérivée du vertex T_3 dans (6.50) s'effectue de la même manière et le dernier terme ne pose aucun problème dans l'intégration sur le vecteur d'onde. Nous obtenons après sommation sur l'impulsion :

$$n_{\uparrow}^{(2a)} = Z^{-1} - \frac{m_{\uparrow}k_0}{2\pi^2} g_{d,\uparrow} Z^{-1} \left[1 + k_{F,\uparrow} a_{d,\uparrow} (C_{a,1} + C_{a,2})\right] \quad (6.57)$$

où la constante $C_{a,2}$ est donnée dans l'article [AL10].

Second terme d'ordre $|\Delta|^2$

Le second terme de la self-énergie généralisée (6.46) contribuant à la densité de l'espèce $\uparrow$ est obtenu en calculant :

$$n_{\uparrow}^{(2b)} = \sum_{k,p} \left[\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\right]^2 \left[T_{3,\uparrow}(k,q;q)\right]^2 T_2(q-k)\,\mathcal{G}_{0,\uparrow}(q) \tag{6.58}$$

Nous utilisons toujours le même principe. Nous réalisons les sommations en les transformant en intégrales de contour puis nous utilisons le théorème de résidus après avoir analysé les propriétés analytiques de l'intégrande. Pour intégrer sur le vecteur d'onde on élimine le vertex $T_3^{\uparrow}$ en faveur de la constante de couplage. Les termes d'ordre le plus bas sont alors obtenus pour des vecteurs d'onde petits devant l'inverse de la longueur de diffusion. Au final, nous obtenons l'expression :

$$n_{\uparrow}^{(2b)} = -\frac{m_{\uparrow}k_0}{2\pi^2} g_{d,\uparrow} Z^{-1} k_{F,\uparrow} a_{d,\uparrow} (C_b - C_{a,2}) \tag{6.59}$$

où la constante C_b est donnée dans l'article [AL10]. En rassemblant les différents résultats (6.48), (6.57) et (6.59), nous obtenons la densité de l'espèce $\uparrow$:

$$n_{\uparrow} \simeq \frac{k_0^3}{6\pi^2} + |\Delta|^2 \left\{ Z^{-1} - \frac{m_{\uparrow}k_0}{2\pi^2} g_{d,\uparrow} Z^{-1} \left[1 + k_0 a_{d,\uparrow} \frac{4}{3\pi} f(\delta)\right]\right\} \tag{6.60}$$

où nous avons remplacé les constantes C_i par la fonction f :

$$f(\delta) = \frac{3\pi}{4}(C_{a,1} + C_b) = \frac{3}{4}\frac{\delta - 1}{\delta} + \frac{3(1+\delta)^2(1-\delta)}{8\delta^2} \log\left(\frac{1+\delta}{1-\delta}\right) \tag{6.61}$$

où δ est un paramètre sans dimension dépendant du rapport des masses comme :

$$\delta = \frac{m_d - m_{\uparrow}}{m_d + m_{\uparrow}} \tag{6.62}$$

où $m_d = m_{\uparrow} + m_{\downarrow}$. Nous devons remarquer que cette fonction $f(\delta)$ a déjà été introduite dans [AGIW02] pour l'équation d'état d'un mélange de bosons de masse m_d et de fermions de masse $m_{\uparrow}$.

6.5.2. Densité de l'espèce $\downarrow$

En utilisant (6.32), (6.33) et (6.36) et en raisonnant de la même façon pour l'espèce $\downarrow$, nous obtenons à l'ordre 0 en Δ :

$$S_{\downarrow}^{(0)}(k) = \sum_{P} T_2(P)\,\mathcal{G}_{0,\uparrow}(P-k) \tag{6.63}$$

La self-énergie généralisée de l'espèce $\downarrow$ à l'ordre 2 en puissance du paramètre d'ordre est :

$$S_{\downarrow}^{(2)}(k) = T_3^{\downarrow}(k,k;k) \tag{6.64}$$

En ne gardant que les termes d'ordre le plus bas en puissance de la self-énergie, nous avons :

$$\mathcal{G}_{\downarrow}(k) \simeq \mathcal{G}_{0,\downarrow}(k) + \left[\mathcal{G}_{0,\downarrow}(k)\right]^2 \left[S_{\downarrow}^{(0)}(k) + |\Delta|^2 S_{\downarrow}^{(2)}(k)\right] \tag{6.65}$$

Nous sommons cette expression sur la quatre-impulsion afin d'obtenir la densité. Le premier terme donne simplement 0 car le potentiel chimique de cette espèce est négatif. Quant au second terme, en effectuant dans (6.63) le changement de variable $P \to P+k$, la sommation sur les fréquences ω_k donne également 0. Pour le dernier terme, nous devons faire le même genre d'analyse qu'à la section précédente. Au même ordre que le développement précédent, nous montrons que les contributions des différents termes se compensent exactement. Au final, nous obtenons [AL10] :

$$n_{\downarrow} = |\Delta|^2 Z^{-1} \tag{6.66}$$

ce qui confirme bien que Δ est un petit paramètre de l'ordre de la densité.

6.5.3. Potentiel chimique μ_B

Pour obtenir le potentiel chimique en fonction des densités, nous utilisons (6.42) où nous devons sommer la fonction (6.43). Pour le membre de gauche de (6.42), nous utilisons l'expression du vertex à deux corps (6.29) où nous développons la racine carrée en puissance du potentiel chimique. Cela conduit à :

$$T_2^{-1}(0) = Z^{-1}\mu_B + R(0) + o\left(\mu_B^2\right) \tag{6.67}$$

Pour le terme de droite, la sommation sur la quatre-impulsion de (6.43) donne deux termes. En comparant avec l'expression du vertex $T_3^{\uparrow}$ (2.1), nous montrons facilement que le premier des deux termes est :

$$\sum_k \mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\sum_q T_2(q-k)\,T_3^{\uparrow}(k,q;q)\,\mathcal{G}_{0,\uparrow}(q) = \sum_q \mathcal{G}_{0,\uparrow}(q)\left[T_3^{\uparrow}(q,q;q)+\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-q)\right] \quad (6.68)$$

Seul le pôle de $\mathcal{G}_{0,\downarrow}$ contribue à la sommation sur les fréquences. Nous obtenons ainsi :

$$\int_{|\mathbf{q}|<k_0} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left[T_3^{\uparrow}(\overline{q},\overline{q};\overline{q})+\mathcal{G}_{0,\downarrow}(\overline{q})\right] \quad (6.69)$$

Nous constatons que le second terme est la fonction $R(0)$ (6.30), et compense donc exactement ce même terme dans (6.67). Pour le $T_3^{\uparrow}$, nous utilisons les résultats obtenus dans le calcul de la densité de l'espèce $\uparrow$. A l'ordre le plus bas $T_3^{\uparrow}(\overline{q},\overline{q};\overline{q}) \simeq g_{d,\uparrow}Z^{-1}$. En sommant le deuxième terme de (6.43), nous reconnaissons le vertex T_4 du chapitre 3. En comparant avec (3.1), nous obtenons la contribution :

$$\sum_k \frac{|\Delta|^2}{2}\mathcal{G}_{0,\uparrow}(k)\,\mathcal{G}_{0,\downarrow}(-k)\,\Phi(k,-k;0,0) = \frac{|\Delta|^2}{2}T_{4,v}(0,0;\{\mathbf{0},\mu_\uparrow+\mu_\downarrow\}) \quad (6.70)$$

où $T_{4,v}$ désigne le vertex T_4 dans le vide que nous avons utilisé au chapitre 3. A l'ordre le plus bas, la somme des potentiels chimiques est égale à l'énergie de liaison. Nous relions alors le vertex T_4 à la constante de couplage dimère-dimère exacte par la relation (3.3). En rassemblant tous les résultats précédents, nous obtenons alors l'équation suivante pour le potentiel chimique des bosons composites :

$$\mu_B \simeq g_{d,\uparrow}\frac{k_0^3}{6\pi^2} + g_{d,d}\frac{|\Delta|^2}{Z} \quad (6.71)$$

6.5.4. Équation d'état

Dans le premier terme de (6.71), nous reconnaissons la densité de particules constituant la mer de Fermi de l'espèce $\uparrow$. Alors que dans le second terme, le paramètre d'ordre au carré est de l'ordre de la densité des dimères condensés. Le potentiel chimique de l'espèce $\uparrow$ est obtenu en utilisant (6.60) et (6.66). Nous remplaçons k_0 par son expression fonction de $\mu_\uparrow$ et en considérant notre équation comme un développement de Taylor, nous obtenons en l'inversant :

$$\mu_\uparrow \simeq \frac{k_F^2}{2m_\uparrow} + g_{d,\uparrow}n_\downarrow\left[1+\frac{4}{3\pi}k_{F,\uparrow}a_{d,\uparrow}f(\delta)\right] \quad (6.72)$$

où $k_F \equiv \left[6\pi^2(n_\uparrow-n_\downarrow)\right]^{1/3}$. Pour obtenir l'équation d'état, nous utilisons la relation

thermodynamique $\mu_\uparrow = [\partial(E/V)/\partial n_\uparrow]_{n_\downarrow}$ où E est l'énergie du gaz dans le volume V. On intègre alors cette relation en rajoutant $n_\uparrow - n_\downarrow$ particules $\downarrow$ à un gaz de $n_\downarrow$ bosons composites. L'énergie vaut alors :

$$\frac{E}{V} = E_b\left(n_\downarrow\right) + \int_{n_\downarrow}^{n_\uparrow} dn_1 \mu_\uparrow\left(n_1, n_\downarrow\right) \tag{6.73}$$

où $E_b\left(n_\downarrow\right)$ est la constante d'intégration, simplement égale à l'énergie d'un gaz de $n_\downarrow$ bosons composites $(-|E_b|n_\downarrow)$. En dérivant (6.73) par rapport à $n_\downarrow$, nous obtenons le potentiel chimique de l'espèce minoritaire $\downarrow$:

$$\mu_\downarrow \simeq -\left|E_b\right| - \frac{k_{F,\uparrow}^2}{2m_\uparrow} + g_{d,d} n_\downarrow + g_{d,\uparrow}\left(n_\uparrow - 2n_\downarrow\right) + g_{d,\uparrow} k_{F,\uparrow} a_{d,\uparrow} \frac{f\left(\delta\right)}{3\pi}\left(3n_\uparrow - 7n_\downarrow\right) \tag{6.74}$$

Nous avons ainsi le potentiel chimique bosonique via (4.49), qui vaut :

$$\mu_B = g_{d,d} n_\downarrow + g_{d,\uparrow}\left(n_\uparrow - n_\downarrow\right)\left[1 + \frac{k_{F,\uparrow} a_{d,\uparrow} f\left(\delta\right)}{\pi}\right] \tag{6.75}$$

Quant à l'énergie (6.73), nous obtenons sans difficulté supplémentaire :

$$\frac{E}{V} = -\left|E_b\right| n_\downarrow + \frac{1}{2} g_{d,d} n_\downarrow^2 + \frac{3}{10}\frac{k_F^5}{m_\uparrow} + g_{d,\uparrow}\left(n_\uparrow - n_\downarrow\right) n_\downarrow\left[1 + \frac{k_F a_{d,\uparrow}}{\pi} f\left(\delta\right)\right] \tag{6.76}$$

L'équation d'état (6.76) est exactement celle obtenue par Albus et al. [AGIW02] dans le cas d'un mélange de $n_\downarrow$ bosons de masse m_d en interaction avec $n_\uparrow - n_\downarrow$ fermions de masse $m_\uparrow$. L'interaction dimère-dimère étant décrite par la longueur de diffusion $a_{d,d}$ alors que l'interaction dimère-fermion $\uparrow$ est décrite par $a_{d,\uparrow}$. Nous avons ici démontré la validité d'une telle équation pour des bosons composites en prenant en compte la nature fermionique des particules qui les constituent. En prenant en compte les problèmes à 3 et 4 corps étudiés en détails dans les chapitres 2 et 3, nous retrouvons les valeurs exactes des longueurs de diffusion.

6.5.5. Impureté et gap à une particule

De l'équation d'état calculée dans le cas général pour un nombre de particules différentes $(N_\uparrow > N_\downarrow)$, nous pouvons extraire deux quantités intéressantes. La première correspond au problème d'une impureté immergée dans une mer de Fermi. Pour une mer de Fermi composée de $N_\uparrow$ particules de densité $n_\uparrow$, nous avons donc 1 particule de l'espèce $\downarrow$ qui correspond à une densité $n_\downarrow = 0$. L'énergie de l'excitation est alors donnée par :

$$E\left(N_{\uparrow},1\right)-E\left(N_{\uparrow},0\right)=\mu_{\downarrow}\left(n_{\uparrow},n_{\downarrow}=0\right) \tag{6.77}$$

En utilisant l'équation (6.74), nous obtenons alors immédiatement :

$$\mu_{\downarrow}^{\mathrm{imp}}\simeq-\left|E_b\right|-\frac{k_{F,\uparrow}^2}{2m_{\uparrow}}+g_{d,\uparrow}n_{\uparrow}\left[1+k_{F,\uparrow}a_{d,\uparrow}\frac{f\left(\delta\right)}{\pi}\right] \tag{6.78}$$

Le résultat (6.78) correspond à celui trouvé par Mora et Chévy [MC09] pour des espèces de masses égales. Il est à noter qu'ils ont également obtenu une correction à l'ordre suivant. Une autre quantité intéressante est le gap à une particule définit comme [RS80, GPS08] :

$$\Delta_{\mathrm{gap}}=\frac{1}{2}\left[2E\left(N+1,N\right)-E\left(N+1,N+1\right)-E\left(N,N\right)\right] \tag{6.79}$$

Ce gap (6.79) correspond, à température nulle, à la moitié de l'énergie nécessaire pour casser une paire. En reliant (6.79) aux potentiels chimiques (6.72) et (6.74) via $\Delta_{\mathrm{gap}}=1/2(\mu_{\uparrow}-\mu_{\downarrow})$, nous obtenons l'expression :

$$\Delta_{\mathrm{gap}}=\frac{\left|E_b\right|}{2}+\left(2g_{d,\uparrow}-g_{d,d}\right)\frac{n_{\downarrow}}{2} \tag{6.80}$$

où pour un gaz non polarisé $n_{\uparrow}=n_{\downarrow}$. Nous retrouvons ainsi le résultat connu pour des masses égales [GPS08].

Conclusion et perspectives

Dans la seconde partie de cette thèse, nous avons étudié certaines propriétés thermodynamiques du problème à N corps. Les gaz de fermions froids réalisés expérimentalement ont permis de mesurer l'équation d'état pour des espèces de même masse. Nous pouvons maintenant comparer les théories aux résultats expérimentaux pour l'équation d'état à l'unitarité et étendre celle-ci au cas où les masses des espèces sont différentes.

Nous avons, dans une première étape, étudié la stabilité d'un gaz de fermions lors de la transition superfluide. Nous avons mis en évidence que des théories simples mais donnant de bons résultats qualitatifs et quantitatifs, comme l'approximation de la matrice T et la théorie NSR, ont un problème. Plus précisément ces théories décrivent la divergence du facteur de compressibilité lors de la transition superfluide. L'extension à la phase superfluide proposée par Pieri, Pisani et Strinati prédit de plus, que ce facteur devient négatif, ce qui provoque l'instabilité du gaz et n'a jamais été observé expérimentalement.

Nous avons ensuite proposé une nouvelle démonstration de la formule de Tan pour l'énergie. Il est bien connu qu'à 2 et 3 dimensions, l'énergie cinétique est divergente à la limite de potentiel de contact. Nous avons mis en évidence que la contribution à l'énergie dans la zone d'interaction est négligeable dans cette limite. Il faut alors évaluer, avec prudence, l'énergie cinétique en dehors de la région où deux particules sont très proches l'une de l'autre. Nous obtenons alors la régularisation de la divergence ainsi qu'un terme supplémentaire complètement déterminé par les propriétés de collisions de 2 particules. Une généralisation de la formule de Tan à 2 dimensions est également proposée. Par une approche de théorie des champs, nous avons étudié les propriétés analytique de la self-energy et mis en évidence une formule similaire à celle proposée par Tan. L'équation d'état peut ainsi être calculée de différentes façons dans l'approximation de la matrice T à l'unitarité et est en accord satisfaisant avec les récents résultats expérimentaux.

Dans le dernier chapitre, nous présentons un développement de l'équation d'état dans la limite BEC en puissance de la densité. Celui-ci est obtenu en incorporant les problèmes à 3 et 4 corps exacts, introduits dans la première partie, et en considérant le cas général où les fermions peuvent avoir des masses différentes et être présents en quantités différentes. Nous trouvons à partir d'une théorie purement fermionique, le résultat obtenu pour un mélange de bosons ponctuels en interaction avec une mer de Fermi. A cet ordre du développement (qui va au delà du champ moyen), nous montrons que la nature fermionique des dimères ne se manifeste pas. Nous avons également accès à l'énergie

d'une impureté dans une mer de Fermi et au gap à une particule.

Il serait intéressant de comprendre comment résoudre le problème de l'instabilité des théories diagrammatiques présentées au chapitre 4. Une piste pourrait être, comme dans le cas du gaz de Bose, de calculer la fonction de Green de manière auto-cohérente. Concernant le développement de l'équation d'état, dans la limite BEC, la correction à l'ordre suivant pourrait être obtenue en étudiant les modes collectifs. C'est l'équivalent de la correction de Lee, Huang et Yang pour l'équation d'état du gaz de Bose. Il se pourrait qu'à cette ordre la nature fermionique des particules composant le dimère se manifeste. Cependant cela semble peu probable car pour des masses égales, il a déjà été prouvé que ce n'est pas le cas.

Annexe A

Développements analytiques

A.1. Décomposition en harmoniques sphériques

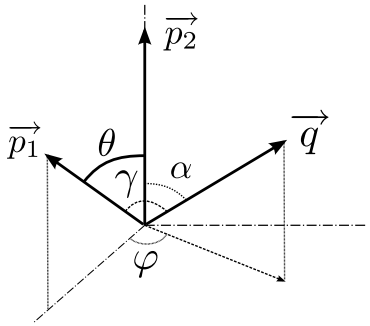


FIGURE A.1.: Définition des angles entre les trois vecteurs $\mathbf{p_1}$, $\mathbf{p_2}$ et $\mathbf{q}$.

On projette l'équation (2.4) sur la base des polynômes de Legendre. Seulement trois vecteurs interviennent dans l'équation intégrale (2.2), on définit alors l'orientation de ces vecteurs sur la figure (A.1), où $\mathbf{q}$ est le vecteur intervenant dans le terme intégral.

$$a_3\left(\mathbf{p_1};\mathbf{p_2}\right) = \sum_l P_l\left[\cos\left(\theta\right)\right] a_3^l\left(p_1;p_2\right) \tag{A.1}$$

$$a_3^l\left(p_1;p_2\right) = \int_{-1}^{1} \frac{d\left[\cos\left(\theta\right)\right]}{\left\|P_l\right\|^2} P_l\left[\cos\left(\theta\right)\right] a_3\left(\mathbf{p_1};\mathbf{p_2}\right) \tag{A.2}$$

avec $\left\|P_l\right\|^2 = \frac{2}{2l+1}$.

De même pour le terme source et le noyau de l'opérateur intégral que l'on note : $\kappa\left(\mathbf{p_1},\mathbf{q};\mathbf{p_2}\right) = G_{0,\downarrow}\left[\left\{-\mathbf{p_1}-\mathbf{q},-\left|E_b\right|+\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_2}\right)+\epsilon_d\left(\mathbf{p_2}\right)-\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{q}\right)-\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_1}\right)\right\}\right]$ (ne dépend que de la norme de $\mathbf{p_2}$).

$$\kappa\left(\mathbf{p_1},\mathbf{q};\mathbf{p_2}\right)=\sum_l P_l\left[\cos\left(\theta\right)\right]\kappa_l\left(p_1,q;p_2\right) \tag{A.3}$$

$$\kappa_l\left(p_1,q;p_2\right)=\int_{-1}^{1}\frac{d\left[\cos\left(\theta\right)\right]}{\left\|P_l\right\|^2}P_l\left[\cos\left(\theta\right)\right]\kappa\left(\mathbf{p_1},\mathbf{q};\mathbf{p_2}\right) \tag{A.4}$$

En utilisant le théorème d'addition des polynômes de Legendre :

$$P_l\left[\cos\left(\gamma\right)\right]=P_l\left[\cos\left(\alpha\right)\right]P_l\left[\cos\left(\theta\right)\right]+2\sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m\left[\cos\left(\alpha\right)\right]P_l^m\left[\cos\left(\theta\right)\right]\cos\left(m\varphi\right) \tag{A.5}$$

On montre alors que seul le premier terme contribue, l'intégration sur l'angle φ donne zéro pour le second terme quel que soit l. On obtient alors les projections de l'amplitude de diffusion sur les différentes ondes :

$$\begin{aligned}a_3^l\left(p_1,p_2\right)=&\frac{\mathbf{p1}^2-\mathbf{p2}^2-i0^+}{4\pi}T_2\left[\left\{-\mathbf{p_1},-\left|E_b\right|+\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_2}\right)+\epsilon_d\left(\mathbf{p_2}\right)-\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_1}\right)\right\}\right]\\&\times\left\{\kappa_l\left(p_1,p_2;p_2\right)+\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dqq^2}{q^2-p_2^2-i0^+}\kappa_l\left(p_1,q;p_2\right)a_3^{\uparrow,(l)}\left(q,p_2\right)\right\}\end{aligned} \tag{A.6}$$

$$\begin{aligned}&\kappa_l\left(p_1,q;p_2\right)=\\&\int_{-1}^{1}\frac{d\left[\cos\left(\theta\right)\right]}{\left\|P_l\right\|^2}\frac{P_l\left[\cos\left(\theta\right)\right]}{-\left|E_b\right|+\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_2}\right)+\epsilon_d\left(\mathbf{p_2}\right)-\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{q}\right)-\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_1}\right)-\epsilon_\downarrow\left(\mathbf{p_1}+\mathbf{q}\right)-i0^+}\end{aligned} \tag{A.7}$$

Ce qui conduit à l'équation pour l'amplitude de diffusion en onde s (2.5) et le noyau vaut alors :

$$\begin{aligned}\kappa_s\left(p_1,q;p_2\right)=&\frac{m_\downarrow}{p_1q}\log\left|\frac{-\left|E_b\right|+\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_2}\right)+\epsilon_d\left(\mathbf{p_2}\right)-\epsilon_d\left(\mathbf{q}\right)-\epsilon_d\left(\mathbf{p_1}\right)+\frac{p_1q}{m_\downarrow}}{-\left|E_b\right|+\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_2}\right)+\epsilon_d\left(\mathbf{p_2}\right)-\epsilon_d\left(\mathbf{q}\right)-\epsilon_d\left(\mathbf{p_1}\right)-\frac{p_1q}{m_\downarrow}}\right|\\&+i\pi\Theta\left[\frac{p_1q}{m_\downarrow}-\left|-\left|E_b\right|+\epsilon_\uparrow\left(\mathbf{p_2}\right)+\epsilon_d\left(\mathbf{p_2}\right)-\epsilon_d\left(\mathbf{q}\right)-\epsilon_d\left(\mathbf{p_1}\right)\right|\right]\end{aligned} \tag{A.8}$$

A.2. Équations intégrales couplées pour les parties réelles et imaginaires de l'amplitude de diffusion dimère-fermion en onde s

En partant de l'équation (2.5) et de l'expression du noyau (A.8), on décompose l'amplitude de diffusion en une partie réelle plus une partie imaginaire notées $a_3^s(p_1;p_2) = \xi(p_1;p_2)+i\eta(p_1;p_2)$. On peut alors décomposer le dénominateur de l'intégrale $q^2-p_2^2-i0^+$ en une partie principale plus une partie imaginaire, on obtient donc deux équations intégrales réelles couplées pour la partie réelle ξ et la partie imaginaire η. Le système est aisément solvable numériquement :

$$2m_{\uparrow,\downarrow}\frac{\left[R\left(p_1,p_2\right)-a_{\uparrow,\downarrow}^{-1}\right]\xi\left(p_1,p_2\right)+J\left(p_1,p_2\right)\eta\left(p_1,p_2\right)}{p_1^2-p_2^2}=\kappa_0\left(p_1,p_2\right)-\frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty\frac{dqq^2\kappa_0\left(q,p_1\right)}{q^2-p_2^2}$$
$$\times\,\xi\left(q,p_2\right)+p_2\kappa_0\left(p_1,p_2\right)\eta\left(p_2,p_2\right)+\frac{m_\downarrow}{p_1}\int_{\left|J(p_1,p_2)-\frac{m_\uparrow}{m_d}p_1\right|}^{J(p_1,p_2)+\frac{m_\uparrow}{m_d}p_1}\frac{dqq}{q^2-p_2^2}\eta\left(q,p_2\right)\quad\text{(A.9)}$$

$$2m_{\uparrow,\downarrow}\frac{\left[R\left(p_1,p_2\right)-a_{\uparrow,\downarrow}^{-1}\right]\eta\left(p_1,p_2\right)-J\left(p_1,p_2\right)\xi\left(p_1,p_2\right)}{p_1^2-p_2^2}=-\frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty\frac{dqq^2\kappa_0\left(q,p_1\right)}{q^2-p_2^2}$$
$$\times\,\eta\left(q,p_2\right)-p_2\kappa_0\left(p_1,p_2\right)\xi\left(p_2,p_2\right)-\frac{m_\downarrow}{p_1}\int_{\left|J(p_1,p_2)-\frac{m_\uparrow}{m_d}p_1\right|}^{J(p_1,p_2)+\frac{m_\uparrow}{m_d}p_1}\frac{dqq}{q^2-p_2^2}\xi\left(q,p_2\right)\quad\text{(A.10)}$$

où κ_0 s'écrit :

$$\kappa_0\left(k,q\right)=\frac{m_\downarrow}{2kq}\log\left|\frac{a_{\uparrow,\downarrow}^{-2}+\left(k+q\frac{m_\uparrow}{m_d}\right)^2+\left(q^2-p_2^2\right)\left(1-\frac{m_\uparrow^2}{m_d^2}\right)}{a_{\uparrow,\downarrow}^{-2}+\left(k-q\frac{m_\uparrow}{m_d}\right)^2+\left(q^2-p_2^2\right)\left(1-\frac{m_\uparrow^2}{m_d^2}\right)}\right|\qquad\text{(A.11)}$$

et les fonctions R et J sont données par :

$$R\left(p_1,p_2\right)=\sqrt{\left|a_{\uparrow,\downarrow}^{-2}+\left(p_1^2-p_2^2\right)\left(1-\frac{m_\uparrow^2}{m_d^2}\right)\right|}\Theta\left[a_{\uparrow,\downarrow}^{-2}+\left(p_1^2-p_2^2\right)\left(1-\frac{m_\uparrow^2}{m_d^2}\right)\right]\qquad\text{(A.12)}$$

$$J\left(p_1,p_2\right)=\sqrt{\left|a_{\uparrow,\downarrow}^{-2}+\left(p_1^2-p_2^2\right)\left(1-\frac{m_\uparrow^2}{m_d^2}\right)\right|}\Theta\left[-a_{\uparrow,\downarrow}^{-2}-\left(p_1^2-p_2^2\right)\left(1-\frac{m_\uparrow^2}{m_d^2}\right)\right]\qquad\text{(A.13)}$$

A.3. Équations intégrales couplées des vertex T_4 et ϕ en onde s et à énergie nulle

A.3.1. Équation du vertex t_4

Nous pouvons calculer certaines intégrales analytiquement afin de simplifier les calculs numériques de la longueur de diffusion dimère-dimère. Pour le lecteur intéressé, nous donnons les noyaux de l'équation (3.6) en unités adimensionnées.

$$t_4^{\text{Born}}\left(p_1,\omega_{p_1}\right)=-\frac{4}{\pi^2}\int_0^\infty\frac{q^2}{1+q^2}\text{Re}J\left[-C_\uparrow\left(q,p_1,\omega_{p_1}\right),-C_\downarrow^*\left(0,p_1,\omega_{p_1}-i\right),q;p_1,p_1,0\right] \tag{A.14}$$

où la fonction J est donnée par :

$$J\left(A,B,k;p_1,p_2,\theta\right)=\frac{1}{2\sqrt{E\left(A,B,k;p_1,p_2,\theta\right)}}\log\left(\frac{AB-4k^2p_1p_2\cos\left(\theta\right)+\sqrt{E\left(A,B,k;p_1,p_2,\theta\right)}}{AB-4k^2p_1p_2\cos\left(\theta\right)-\sqrt{E\left(A,B,k;p_1,p_2,\theta\right)}}\right) \tag{A.15}$$

$$E\left(A,B,k;p_1,p_2,\theta\right)=4k^2\left\{\left(Ap_2\right)^2+\left(Bp_1\right)^2-2ABp_1p2\cos\left(\theta\right)-\left[2kp_1p_2\sin\left(\theta\right)\right]^2\right\} \tag{A.16}$$

ainsi que les fonctions :

$$C_\sigma\left(q,k,\omega\right)=k^2+\frac{m_d}{m_\sigma}\left(1+q^2-i\omega\right) \tag{A.17}$$

$$t_{4\phi}\left(q_1,q_2,\alpha;p_1,\omega_{p_1}\right)=\frac{4}{\pi^3}q_1^2q_2^2\frac{m_d}{m_{\uparrow,\downarrow}p_1^2}t_2\left[2+\frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{m_{\uparrow,d}}q_1^2+\frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{m_{\downarrow,d}}q_2^2+\frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{m_{d,d}}q_1q_2\cos\left(\alpha\right)\right]\times\text{Re}J\left[-C_\uparrow\left(q_1,p_1,\omega_{p_1}\right),C_\downarrow^*\left(q_2,p_1,\omega_{p_1}\right),p_1;q_1,q_2,\alpha\right] \tag{A.18}$$

où le vertex fermion-fermion en unité adimensionné est donné par :

$$t_2\left(x\right)=\left(1-\sqrt{x}\right)^{-1} \tag{A.19}$$

$$t_{4t_4}\left(q_1,\omega_{q_1};p_1,\omega_{p_1}\right)=-\frac{2q_1^2}{\pi^3}\frac{m_d^2}{m_\downarrow m_{\uparrow,\downarrow}}\left|t_2\left(1+\frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{m_d}q_1^2+i\omega_{q_1}\right)\right|^2\kappa\left(q_1,\omega_{q_1};p_1,\omega_{p_1}\right) \quad \text{(A.20)}$$

$$\begin{aligned}\kappa\left(q_1,\omega_{q_1};p_1,\omega_{p_1}\right)=\mathrm{Re}\int_0^\infty dp\int_0^\pi d\alpha\sin\left(\alpha\right)\frac{1}{\beta+\gamma-\eta}\left\{J\left[\beta,\eta-\beta,p;p_1,q_1,\alpha\right]\right.\\ \left.-J\left[\beta,\gamma,p;p_1,q_1,\alpha\right]-J\left[\eta,\eta-\beta,p;x,q_1,\theta\right]+J\left[\eta,\gamma,p;x,q_1,\theta\right]\right\}+\left(\omega_{p_1}\rightarrow-\omega_{p_1}\right)\end{aligned} \quad \text{(A.21)}$$

où pour simplifier la notation, nous posons :

$$x=k^2+p^2+2kp\cos\left(\alpha\right) \quad \text{(A.22)}$$

$$\theta=\arccos\left(\frac{k\cos\left(\alpha\right)+p}{x}\right) \quad \text{(A.23)}$$

$$\beta=C_\downarrow\left(k,p_1,\omega_{p_1}\right) \quad \text{(A.24)}$$

$$\gamma=C_\downarrow\left(k,q_1,\omega_{q_1}\right) \quad \text{(A.25)}$$

$$\eta=C_\uparrow^*\left[0,x,\omega_{p_1}+\omega_{q_1}-i\right] \quad \text{(A.26)}$$

A.3.2. Équation du vertex ϕ

De la même manière qu'à la section précédente, nous donnons les noyaux de l'équation (3.7) utilisés dans la résolution numérique :

$$\phi^{\mathrm{Born}}\left(p_1,p_2\right)=\frac{1}{\left(1+p_1^2\right)\left(1+p_2^2\right)} \quad \text{(A.27)}$$

$$\phi_{\phi_1}\left(q_1,\alpha;p_1,p_2,\theta\right)=\frac{q_1^2}{\pi}\frac{t_2\left(2+r_\uparrow q_1^2+r_\downarrow p_2^2+r_d q_1 p_2\cos\left(\alpha\right)\right)}{\sqrt{A_+\left(q_1,\alpha;p_1,p_2,\theta\right)A_-\left(q_1,\alpha;p_1,p_2,\theta\right)}} \quad \text{(A.28)}$$

où

$$A_{\pm}\left(q_1,\alpha;p_1,p_2,\theta\right)=2+p_1^2+q_1^2+\frac{2m_{\uparrow,\downarrow}}{m_{\downarrow}}\left[p_2^2+p_1p_2\cos\left(\theta\right)+q_1p_2\cos\left(\alpha\right)+p_1q_1\cos\left(\alpha\pm\theta\right)\right] \tag{A.29}$$

$$\phi_{\phi_2}\left(q_2,\alpha;p_1,p_2,\theta\right)=\frac{q_2^2}{\pi}\frac{t_2\left(2+r_{\uparrow}p_1^2+r_{\downarrow}q_2^2+r_dp_1q_2\cos\left(\alpha\right)\right)}{\sqrt{B_+\left(q_2,\alpha;p_1,p_2,\theta\right)B_-\left(q_2,\alpha;p_1,p_2,\theta\right)}} \tag{A.30}$$

où

$$B_{\pm}\left(q_2,\alpha;p_1,p_2,\theta\right)=2+p_2^2+q_2^2+\frac{2m_{\uparrow,\downarrow}}{m_{\uparrow}}\left[p_1^2+p_1p_2\cos\left(\theta\right)+p_1q_2\cos\left(\alpha\right)+p_2q_2\cos\left(\alpha\pm\theta\right)\right] \tag{A.31}$$

$$\phi_{t_4}\left(q_1,\omega_{q_1};p_1,p_2,\theta\right)=-q_1^2\frac{2m_d^2}{\pi m_{\uparrow,\downarrow}^2}\left|t_2\left(1+\frac{m_{\uparrow,\downarrow}}{m_d}q_1^2+i\omega_{q_1}\right)\right|^2 \tag{A.32}$$

$$\times\mathrm{Re}J\left[C_{\uparrow}^{*}\left(p_1,q_1,\omega_{q_1}\right),-C_{\downarrow}\left(p_2,q_1,\omega_{q_1}\right),q_1;p_1,p_2,\theta\right] \tag{A.33}$$

A.4. Sommation sur les fréquences de Matsubara à température nulle

Dans le formalisme en théorie des champs à température finie, nous utilisons les fréquences de Matsubara fermioniques ou bosoniques. Lors d'une sommation d'une fonction sur son quatre-vecteur, nous devons la sommer sur ces fréquences de Matsubara qui sont situées sur l'axe imaginaire.

$$i\omega_n=\frac{\left(2n+1\right)i\pi}{\beta} \qquad \text{où } n\in\mathbb{Z} \tag{A.34}$$

$$i\omega_\nu=\frac{2\nu i\pi}{\beta} \qquad \text{où } \nu\in\mathbb{Z} \tag{A.35}$$

Afin de transformer les sommations en une intégrale de contour, nous utilisons la distribution de Fermi-Dirac (4.36) dont les pôles sont les fréquences de Matsubara fermioniques (A.34) de résidu $-\beta^{-1}$. Nous transformons la somme en une intégrale sur le contour $\mathcal{C}$ qui tourne dans le sens horaire autour de l'axe imaginaire :

$$\beta^{-1}\sum_n g\left(i\omega_n\right)=\int_{\mathcal{C}}\frac{d\omega}{2i\pi}f\left(\omega\right)g\left(\omega\right) \tag{A.36}$$

A température nulle, la distribution de Fermi-Dirac (4.36) vaut 0 si la fréquence à une

partie réelle positive et 1 sinon. On en déduit simplement dans cette limite :

$$\beta^{-1} \sum_n g\left(i\omega_n\right) = \int_{\mathcal{R}-} \frac{d\omega}{2i\pi} g\left(\omega\right) \tag{A.37}$$

où nous définissons $\mathcal{R}-$ comme un contour entourant les singularités de g à partie réelle négative. De la même manière, les pôles de la distribution de Bose-Einstein (A.38) sont les fréquences de Matsubara bosoniques de résidu $-\beta^{-1}$.

$$b\left(\omega\right) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1} \tag{A.38}$$

En effectuant le même raisonnement, on obtient que la sommation sur les fréquences bosoniques se transforme en l'intégrale de contour :

$$\beta^{-1} \sum_\nu g\left(i\omega_\nu\right) = \int_{\mathcal{R}-} \frac{d\omega}{2i\pi} g\left(\omega\right) \tag{A.39}$$

Dans le chapitre 6, nous utilisons (A.36) et (A.39). En étudiant les singularités des intégrandes à partie réelle négative, nous pouvons alors réaliser les sommations sur les fréquences.

Bibliographie

[ACL10] F. Alzetto, R. Combescot and X. Leyronas, *Atom-dimer scattering length for fermions with different masses : Analytical study of limiting cases*, Phys. Rev. A **82**, 062706 (2010).

[AEM+95] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman and E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995).

[AGD65] A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov and I. Y. Dzyaloshinskii, *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics* (Pergamon Press, 1965).

[AGIW02] A. P. Albus, S. A. Gardiner, F. Illuminati and M. Wilkens, *Quantum field theory of dilute homogeneous Bose-Fermi mixtures at zero temperature : General formalism and beyond mean-field corrections*, Phys. Rev. A **65**, 053607 (2002).

[AL10] F. Alzetto and X. Leyronas, *Equation of state of a polarized Fermi gas in the Bose-Einstein-condensate limit*, Phys. Rev. A **81**, 043604 (2010).

[AS65] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions : with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Dover Publications, 1965).

[Asl08] C. Aslangul, *Mécanique quantique : Tome 2, Développements et applications à basse énergie* (De Boeck, 2008).

[BCS57] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivi*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).

[BD02] J.-L. Basdevant and J. Dalibard, *Mécanique quantique* (Les Editions de l'Ecole polytechnique, 2002).

[Bel61] V. A. Belyakov, JETP **13**, 850 (1961).

[BKK+06] I. V. Brodsky, M. Y. Kagan, A. V. Klaptsov, R. Combescot and X. Leyronas, *Exact diagrammatic approach for dimer-dimer scattering and bound states of three and four resonantly interacting particles*, Phys. Rev. A **73**, 032724 (2006).

[Bog58] N. N. Bogoliubov, Sov. Phys. JETP **7**, 41 (1958).

[BU37] E. Beth and G. E. Uhlenbeck, *The quantum theory of the non-ideal gas. II. Behaviour at low temperatures*, Physica **4**, 915 (1937).

[CAL09] R. Combescot, F. Alzetto and X. Leyronas, *Particle distribution tail and related energy formula*, Phys. Rev. A **79**, 053640 (2009).

[CL08] R. Combescot and X. Leyronas, *Superfluid equation of state of cold fermionic gases in the Bose-Einstein regime*, Phys. Rev. A **78**, 053621 (2008).

[CLK06] R. Combescot, X. Leyronas and M. Y. Kagan, *Self-consistent theory for molecular instabilities in a normal degenerate Fermi gas in the BEC-BCS crossover*, Phys. Rev. A **73**, 023618 (2006).

[CT97] C. Cohen-Tannoudji, *Condensation de Bose-Einstein : gaz sans interactions*, in *Cours de Physique Atomique et Moléculaire au Collège de France* (1997).

[CT98] C. Cohen-Tannoudji, *Condensation de Bose-Einstein des gaz atomiques ultra froids ; effets des interactions*, in *Cours de Physique Atomique et Moléculaire au Collège de France* (1998).

[CW11] Y. Castin and F. Werner, *Single-Particle Momentum Distribution of an Efimov trimer*, ArXiv e-prints (2011).

[DMA+95] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn and W. Ketterle, *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).

[FW71] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Mc Graw-Hill Book Company, 1971).

[Gal58] V. M. Galitskii, JETP **7**, 104 (1958).

[Gir10] S. Giraud, *Contribution à la théorie des gaz de fermions ultrafroids fortement polarisés*, Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI) (2010).

[GMB61] L. P. Gor'kov and T. K. Melik-Barkhudarov, *Contribution to the theory of superfluidity in an imperfect Fermi gas*, Soviet Physics JETP **13**, 1018 (1961).

[GPS08] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Theory of ultracold atomic Fermi gases*, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).

[Ho04] T.-L. Ho, *Universal Thermodynamics of Degenerate Quantum Gases in the Unitarity Limit*, Phys. Rev. Lett. **92**, 090402 (2004).

[HRCZ07] R. Haussmann, W. Rantner, S. Cerrito and W. Zwerger, *Thermodynamics of the BCS-BEC crossover*, Phys. Rev. A **75**, 023610 (2007).

[Isk10] M. Iskin, *Dimer-atom scattering between two identical fermions and a third particle*, Phys. Rev. A **81**, 043634 (2010).

[JRFG04] A. S. Jensen, K. Riisager, D. V. Fedorov and E. Garrido, *Structure and reactions of quantum halos*, Rev. Mod. Phys. **76**, 215 (2004).

[KZ08] W. Ketterle and M. W. Zwierlein, *Making, probing and understanding ultracold Fermi gases*, Nuovo Cimento Rivista Serie **31**, 247 (2008).

[Leg80] A. J. Leggett, *Cooper pairing in spin-polarized Fermi systems*, J. Phys. Colloques **41**, 19 (1980).

[LG06] J. Levinsen and V. Gurarie, *Properties of strongly paired fermionic condensates*, Phys. Rev. A **73**, 053607 (2006).

[MC09] C. Mora and F. Chevy, *Ground state of a tightly bound composite dimer immersed in a Fermi sea*, Phys. Rev. A **80**, 033607 (2009).

[MKSP08] B. Marcelis, S. J. J. M. F. Kokkelmans, G. V. Shlyapnikov and D. S. Petrov, *Collisional properties of weakly bound heteronuclear dimers*, Phys. Rev. A **77**, 032707 (2008).

[Nam60] Y. Nambu, *Quasi-Particles and Gauge Invariance in the Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **117**, 648 (1960).

[NNJ+10] S. Nascimbène, N. Navon, K. J. Jiang, F. Chevy and C. Salomon, *Exploring the thermodynamics of a universal Fermi gas*, Nature **463**, 1057 (2010).

[Noz63] P. Nozières, *Le problème à N corps* (Dunod, 1963).

[NSR85] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, *Bose condensation in an attractive fermion gas : From weak to strong coupling superconductivity*, J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985).

[PAP+07] D. S. Petrov, G. E. Astrakharchik, D. J. Papoular, C. Salomon and G. V. Shlyapnikov, *Crystalline Phase of Strongly Interacting Fermi Mixtures*, Phys. Rev. Lett. **99**, 130407 (2007).

[PPS04] P. Pieri, L. Pisani and G. C. Strinati, *BCS-BEC crossover at finite temperature in the broken-symmetry phase*, Phys. Rev. B **70**, 094508 (2004).

[PS00] P. Pieri and G. C. Strinati, *Strong-coupling limit in the evolution from BCS superconductivity to Bose-Einstein condensation*, Phys. Rev. B **61**, 15370 (2000).

[PS06] P. Pieri and G. C. Strinati, *Exact treatment of trapped imbalanced fermions in the BEC limit*, ArXiv Condensed Matter e-prints (2006).

[PSS04] D. S. Petrov, C. Salomon and G. V. Shlyapnikov, *Weakly Bound Dimers of Fermionic Atoms*, Phys. Rev. Lett. **93**, 090404 (2004).

[RS80] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, 1980).

[RTBJ03] C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn and D. S. Jin, *Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms*, Nature **424**, 47 (2003).

[Sa 08] C. A. R. Sa de Melo, *When fermions become bosons : Pairing in ultracold gases*, Physics Today **61**, 45 (2008).

[STM57] G. V. Skorniakov and K. A. Ter-Martirosian, *Three Body Problem for Short Range Forces. I. Scattering of Low Energy Neutrons by Deuterons*, Soviet Physics JETP **4**, 648 (1957).

[Tan08] S. Tan, *Energetics of a strongly correlated Fermi gas*, Annals of Physics **323**, 2952 (2008).

Publications

Publication 1 :

R. Combescot, F. Alzetto et X. Leyronas, *Particle distribution tail and related energy formula*, Phys. Rev. A **79**, 053640 (2009).

Publication 2 :

F. Alzetto et X. Leyronas, *Equation of state of a polarized Fermi gas in the Bose-Einstein-condensate limit*, Phys. Rev. A **81**, 043604 (2010).

Publication 3 :

F. Alzetto, R. Combescot et X. Leyronas, *Atom-dimer scattering length for fermions with different masses : Analytical study of limiting cases*, Phys. Rev. A **82**, 062706 (2010).

Particle distribution tail and related energy formula

R. Combescot,[1,2] F. Alzetto,[1] and X. Leyronas[1]
[1]*Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France*
[2]*Institut Universitaire de France, 103 boulevard Saint-Michel, 75005 Paris, France*
(Received 28 January 2009; published 29 May 2009)

We present a simple derivation of the energy formula found by Tan, relative to the single-channel Hamiltonian relevant for ultracold Fermi gases. This derivation is generalized to particles with different masses, to arbitrary mixtures, and to two-dimensional space. We show how in a field-theoretic approach, the $1/k^4$ tail in the momentum distribution and the energy formula arise in a natural way. As a specific example, we consider quantitative calculations of the energy from different formulas within the ladder diagram approximation in the normal state. The comparison of the results provides an indication on the quality of the approximation.

DOI: 10.1103/PhysRevA.79.053640 PACS number(s): 03.75.Ss, 05.30.−d, 71.10.Ca, 67.90.+z

I. INTRODUCTION

The remarkable progress in the field of ultracold atomic gases has provided access to a number of systems which may display quite new physical properties. One of the most striking example is provided by ultracold fermionic gases [1] and the Bose-Einstein condensate (BEC)–BCS crossover. While the physics of BECs is known from superfluid ^{4}He (and from ultracold bosonic atomic gases) and that of BCS condensates is known from superconductors, fermionic gases provide systems which display a smooth continuous evolution between these two extremes. This is made possible by the existence of Feshbach resonances which allow control of the value of the scattering length a merely by changing the applied magnetic field. For ultracold gases the kinetic energy of the atoms is so small that only s-wave scattering is relevant, and it is fully characterized by the scattering length. Since Pauli principle forbids s-wave scattering between identical fermions, the scattering length corresponds in most of the experiments performed so far to scattering between atoms in different hyperfine states of a same element. These hyperfine states are often called for convenience "spin up" and "spin down." In the case of a wide Feshbach resonance (as it occurs, for example, for ^{6}Li and ^{40}K), the closed channel responsible for the Feshbach resonance may be omitted and the system is described by a single-open-channel Hamiltonian, where the interaction is characterized by the single parameter a. With the densities produced in experiments this interaction has quite a small range compared to the interatomic distance. This single-channel Hamiltonian is particularly interesting because it is at the same time very simple and highly nontrivial, and moreover it is realized with an excellent precision in these ultracold fermionic gases. Hence we may hope, in getting full control and understanding of this Hamiltonian, to gain knowledge which may be applicable to more complex Hamiltonians, such as those encountered in condensed-matter physics or in quark matter [2].

In this context a simple general expression for the energy of a system described by this Hamiltonian was found by Tan [3], which involves only the momentum distribution $n_\sigma(k)$ of the particles together with their large-k behavior. However the details raise unanswered mathematical difficulties. Nevertheless the expression can be checked in limiting cases (see Appendix A for details). This expression is of high interest since it is quite nontrivial. It is directly related to the well-known problem that for a contact interaction, the kinetic energy presents a formal divergence, because the momentum distribution $n_\sigma(k)$ behaves as $1/k^4$ for large momentum (as found, for example, in the perturbative calculation of Belyakov [4]), a feature merely linked to two-body physics. Naturally there is no divergence in the energy itself, because the interaction energy comes in to compensate for this feature from the kinetic energy. This is easily seen from a simple finite-range interaction model (for example, the square-well potential), with range r_0. The momentum distribution decreases more rapidly than $1/k^4$ for momentum beyond $1/r_0$, which acts as a cutoff in momentum space. The apparently singular situation is found when one lets $r_0 \to 0$, which should be taken as the definition of the contact interaction. In the formula found by Tan [3], the total energy appears essentially as the kinetic energy with this divergence problem removed. Indeed the high-momentum part, responsible for the divergence, is subtracted out and an additional explicit contribution which contains the scattering length appears.

This matter was taken up recently by Braaten and Platter [5], who made use of the operator product expansion developed by Wilson. In this way they derived the energy relation in a compact and formal way. In contrast with the Tan approach, the interaction comes in explicitly. Braaten and Platter [5] also obtained the expression of the known [6] adiabatic relation for this contact potential Hamiltonian. This convenient expression in terms of the scattering length and of the coefficient of the $1/k^4$ tail in the momentum distribution was pointed out by Tan [7]. Quite recently it has been used [8] to obtain the number of closed-channel molecules in the two-channel model. Also very recently it was derived and studied in detail by Zhang and Leggett [9].

In this paper we present first a derivation of this energy formula, which is simple, explicit, and fairly short and avoids unnecessary and uncontrolled mathematical complications. It is in line with the Tan approach, in that it deals only with the kinetic energy. This is done in a careful way in order to avoid divergences. Our treatment is similar in spirit to Ref. [9]. This simple proof allows straightforward generalizations to more complicated situations, with unequal masses, several kinds of particles, and two-dimensional (2D) space. Next we show how, in a field-theoretic approach, the

 ©2009 The American Physical Society

$1/k^4$ tail in the momentum distribution and the energy formula arise in a natural way. Finally, as a specific example, we consider also quantitative calculations within the ladder diagram approximation in the normal state. There are different ways to obtain the energy and we can compare the various approximate results, which gives an indication on the quality of the approximation.

II. DETAILED DERIVATION

In this paragraph we consider the case where we have only two kinds of particles which are ultracold fermions. The volume of the system is assumed to be unity. Namely, we have $n_\uparrow$ particles with mass $m_\uparrow$ and $n_\downarrow$ particles with mass $m_\downarrow$. We consider directly the case where the masses $m_\uparrow$ and $m_\downarrow$ are different since it does not make any problem. The positions of the $\uparrow$ particles are denoted $\mathbf{r}_i$, while those of the $\downarrow$ particles are $\boldsymbol{\rho}_j$. For these ultracold fermions only s-wave scattering has to be taken into account. Hence only interactions between $\uparrow$ and $\downarrow$ particles have to be considered. Generalizations are considered in Sec. III. The Hamiltonian reads $H=H_c+\mathcal{V}$, with (we take $\hbar=1$)

$$H_c = -\frac{1}{2m_\uparrow}\sum_{i=1}^{n_\uparrow}\Delta_{\mathbf{r}_i} - \frac{1}{2m_\downarrow}\sum_{j=1}^{n_\downarrow}\Delta_{\boldsymbol{\rho}_j} \tag{1}$$

and

$$\mathcal{V} = \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i - \boldsymbol{\rho}_j). \tag{2}$$

We assume the interaction potential $V(\mathbf{r})$ to be short range. For clarity and simplicity we assume that it has a definite range r_0 and satisfies $V(\mathbf{r})=0$ for $r>r_0$. However, just as in standard scattering theory [6], the results will hold for physical short-range potentials where the interaction decreases rapidly enough with interparticle distance.

We consider an eigenfunction $|\Phi\rangle$ of this Hamiltonian, having, for example, in mind the ground-state wave function. However this is not necessary and we can as well consider excited states, which leads to the extension of the results to nonzero temperature, as pointed out by Tan [3]. Let $\Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\})$ be the corresponding wave function, with proper symmetrization and normalization to unity. We want to calculate the energy corresponding to this state:

$$E = \langle\Phi|H|\Phi\rangle = \int d\mathbf{r}_i d\boldsymbol{\rho}_j \Phi^*(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\})(H_c+\mathcal{V})\Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\}), \tag{3}$$

where $d\mathbf{r}_i d\boldsymbol{\rho}_j$ is for $\Pi_{i,j} d\mathbf{r}_i d\boldsymbol{\rho}_j$, with $i=1,\ldots,n_\uparrow$ and $j=1,\ldots,n_\downarrow$.

We follow the basic principle put forward by Tan [3]. In Eq. (3) the potential $V(\mathbf{r})$ comes in only in the regions of the integration domain where $|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|<r_0$, where $m=1,\ldots,n_\uparrow$ and $n=1,\ldots,n_\downarrow$. The overlap between these regions is negligible for dilute gases where r_0 is small compared with the mean interparticle distance d. In particular, since the domain corresponding to three particles being close together is negligible, this means that we will not deal directly with three-body problems. [However three-body and more generally many-body effects appear indirectly in the value of the many-body wave function $\Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\})$.] There are $n_\uparrow n_\downarrow$ such regions satisfying $|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|<r_0$. Compared to the total integration domain, the domain of these regions is of order $(r_0/d)^3$. For equal populations $n_\uparrow=n_\downarrow\equiv k_F^3/6\pi^2$, this would be of order $(k_F r_0)^3$. Since we have $H\Phi=E\Phi$ also inside these regions, and that Φ inside these regions has no singular behavior (this can be checked explicitly since this behavior is obtained from a one-body Schrödinger equation, as we use below), we may neglect the contribution of these regions. Actually this has to be done for consistency since [9] keeping only s-wave scattering for ultracold gases implies that terms of order $(k_F r_0)^2$, corresponding to higher angular momenta, are neglected. Hence the energy is simply obtained by calculating the kinetic energy outside these regions:

$$E = \int_{|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|>r_0} d\mathbf{r}_i d\rho_j \Phi^*(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\}) H_c \Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\}). \tag{4}$$

We introduce now the Fourier transform $\varphi(\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\})$ of $\Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\})$ with respect to all variables:

$$\Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\}) = \sum_{\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\}} \exp\left(i\sum_i \mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_i + i\sum_j \mathbf{q}_j\cdot\boldsymbol{\rho}_j\right)\varphi(\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\}), \tag{5}$$

where we use the notation $\Sigma_{\mathbf{k}}\equiv(2\pi)^{-3}\int d\mathbf{k}$. The one-particle density distributions $n_\uparrow(k)$ and $n_\downarrow(k)$ are given by

$$n_\uparrow(k_1) = n_\uparrow \sum_{\{\mathbf{k}_i, i\neq 1\},\{\mathbf{q}_j\}} |\varphi(\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\})|^2,$$

$$n_\downarrow(q_1) = n_\downarrow \sum_{\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j, j\neq 1\}} |\varphi(\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\})|^2. \tag{6}$$

This leads to

$$E = \sum_{\{\mathbf{k}_i'\},\{\mathbf{q}_j'\}} \varphi^*(\{\mathbf{k}_i'\},\{\mathbf{q}_j'\}) \times \sum_{\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\}} \left[\frac{1}{2m_\uparrow}\sum_{M=1}^{n_\uparrow} k_M^2 + \frac{1}{2m_\downarrow}\sum_{N=1}^{n_\downarrow} q_N^2\right]\varphi(\{\mathbf{k}_i\},\{\mathbf{q}_j\}) \int_{|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|>r_0} d\mathbf{r}_i d\boldsymbol{\rho}_j \exp\left\{i\sum_i(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_i')\cdot\mathbf{r}_i + i\sum_j(\mathbf{q}_j-\mathbf{q}_j')\cdot\boldsymbol{\rho}_j\right\}. \tag{7}$$

If we did not have the restrictions $|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|>r_0$ in the last integral, it would give a factor proportional to $\Pi_i\delta(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_i')\Pi_j\delta(\mathbf{q}_j-\mathbf{q}_j')$ and we would find the standard expression for the kinetic energy:

$$E_c=\frac{1}{2m_\uparrow}\sum_{\mathbf{k}_1}k_1^2n_\uparrow(k_1)+\frac{1}{2m_\downarrow}\sum_{\mathbf{q}_1}q_1^2n_\downarrow(q_1), \tag{8}$$

which displays a divergence for large wave vector. Hence the restriction is crucial in order to avoid the divergence.

However, since we want to have the standard expression for the kinetic energy appearing, we will write

$$\int_{|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|>r_0}d\mathbf{r}_id\boldsymbol{\rho}_j=\int d\mathbf{r}_id\boldsymbol{\rho}_j-\sum_{m,n}\int_{|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|<r_0}d\mathbf{r}_id\boldsymbol{\rho}_j, \tag{9}$$

where for simplicity we have not written explicitly the exponential integrand appearing in Eq. (7). As long as all the k_i and q_j integrations are not performed in Eq. (7), no singularity appears so we can handle the various terms in Eq. (9) separately. As we have just mentioned the first one leads to the standard kinetic-energy expression, so we have just to handle the other terms quite carefully since the limit $r_0\to 0$ is singular. Note that in the regions $|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|<r_0$, we will deal with the analytic continuation of the expression of the wave function for $|\mathbf{r}_m-\boldsymbol{\rho}_n|>r_0$, which we will discuss below. This is naturally quite different from its physical value in these regions, since for this last one, the interaction $V(\mathbf{r})$ has to be taken into account.

Let us consider the term $m=n=1$ in Eq. (9). In Eq. (7) only the terms $(1/2m_\uparrow)k_1^2+(1/2m_\downarrow)q_1^2$ in the bracket will be relevant, and for now on we consider only these ones. Basically we will deal carefully with this two-body problem. Accordingly it is convenient to think, as long as we are not back to the many-body problem, that only these two particles scatter. Equivalently we could handle all the $\{m,n\}$ terms simultaneously, but this is much more cumbersome presentation. Since they are more convenient for expressing the condition $|\mathbf{r}_1-\boldsymbol{\rho}_1|<r_0$, we introduce the relative position $\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\boldsymbol{\rho}_1$ and the center-of-mass position $\mathbf{R}=(m_\uparrow\mathbf{r}_1+m_\downarrow\boldsymbol{\rho}_1)/M$, together with their conjugate variables the total momentum $\mathbf{K}=\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1$ and the relative momentum $\mathbf{k}=(m_\downarrow\mathbf{k}_1-m_\uparrow\mathbf{q}_1)/M$, with $M=m_\uparrow+m_\downarrow$. We have

$$\frac{1}{2m_\uparrow}k_1^2+\frac{1}{2m_\downarrow}q_1^2=\frac{1}{2\mu}k^2+\frac{1}{2M}K^2, \tag{10}$$

where $\mu=m_\uparrow m_\downarrow/(m_\uparrow+m_\downarrow)$ is the reduced mass. The difficulties arise from the $k^2/2\mu$ term in the large-k limit.

It is convenient for the discussion to introduce the Fourier transform $\bar{\varphi}(\mathbf{k},\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})$ of the wave function with respect to the variables $\mathbf{r}$ and $\mathbf{R}$, instead of $\mathbf{r}_1$ and $\boldsymbol{\rho}_1$. It is merely given by

$$\bar{\varphi}(\mathbf{k},\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})=\varphi\left(\mathbf{k}+\frac{m_\uparrow}{M}\mathbf{K},-\mathbf{k}+\frac{m_\downarrow}{M}\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\}\right). \tag{11}$$

Making use, in Eqs. (7) and (9), of $(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_1')\cdot\mathbf{r}_1+(\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_1')\cdot\boldsymbol{\rho}_1=(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}+(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\cdot\mathbf{R}$, together with $d\mathbf{r}_1d\boldsymbol{\rho}_1=d\mathbf{r}d\mathbf{R}$ and $d\mathbf{k}_1d\mathbf{q}_1=d\mathbf{k}d\mathbf{K}$, we find that for the $k^2/2\mu$ term in Eq. (10), we have to deal with

$$\sum_{\mathbf{K},\mathbf{kq}_2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\bar{\varphi}^*(\mathbf{k}',\mathbf{K},\mathbf{kq}_2)k^2\bar{\varphi}(\mathbf{k},\mathbf{K},\mathbf{kq}_2)\int_{r<r_0}d\mathbf{r}e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}, \tag{12}$$

where $\mathbf{kq}_2$ is shorthand for $\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\}$. We have used the fact that integration over all unrestricted position variables gives corresponding δ functions for the corresponding wave-vector variables, as we have mentioned above. The problem for large k in this expression is directly linked to the behavior of the wave function for small relative distance r, which we consider now.

When the relative distance r is small compared to the mean interparticle distance d, the dependence of the wave function $\Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\})$ on $\mathbf{r}$ is given by the solution of the relative motion of the two-body problem. For ultracold gases the energy corresponding to this motion is nearly zero and the corresponding wave function is, for $r>r_0$, proportional to $\psi(r)$ with $\psi(r)\equiv 1/r-1/a$, where a is the scattering length [1]. This form is actually valid provided r is small compared to a typical particle wavelength, that is, $r\ll d$. Since we have $r_0\ll d$, there is a range of validity for this form for $r>r_0$. We are also interested in the case of large positive a, where a two-body bound state exists with wave function proportional to $\exp(-r/a)/r$. In this case the above form requires $r\ll a$. There is again a range of validity for this condition for $r>r_0$ since we are in practice interested in physical situations where the scattering length a is large compared to the potential range r_0. Hence for small r we have

$$\Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\})=\psi(r)\bar{\Phi}(\mathbf{R},\{\mathbf{r}_2,\ldots\},\{\boldsymbol{\rho}_2,\ldots\}). \tag{13}$$

Since in the evaluation of the $\int_{r<r_0}$ term of Eq. (9), we will let $r_0\to 0$; only large values of $\mathbf{k}$ are relevant. Indeed if we considered only bounded values $k<k_c$, this term would go to zero for $r_0\to 0$ (and the k integral would converge because of the cutoff k_c). Hence we have to consider $k\to\infty$. In this case the dependence of $\bar{\varphi}(\mathbf{k},\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})$ on k is entirely linked to the short-distance behavior on r of $\Phi(\{\mathbf{r}_i\},\{\boldsymbol{\rho}_j\})$ given by Eq. (13). We have in this limit

$$\bar{\varphi}(\mathbf{k},\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})=\psi_F(k)\bar{\Phi}_F(\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\}), \tag{14}$$

where $\psi_F(k)$ and $\bar{\Phi}_F(\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})$ are the Fourier transform of $\psi(r)$ and $\bar{\Phi}(\mathbf{R},\{\mathbf{r}_2,\ldots\},\{\rho_2,\ldots\})$, respectively.

As well known, the Fourier transform of $1/r$ is $4\pi/k^2$. On the other hand, for the calculation of $k^2\bar{\varphi}(\mathbf{k},\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})$ in expression (12), we do not have to take into account the constant $-1/a$ in the wave function since it gives zero when we apply on it the kinetic-energy operator $\Delta_{\mathbf{r}}$ (corresponding to the factor k^2). All this Fourier-transform calculation can be done quite carefully by multiplying the wave function $\psi(r)$ by a convergence factor $e^{-\eta r}$, then letting $\eta\to 0_+$. This confirms the above results. Finally, when handling expression (12), we have merely $k^2\bar{\varphi}(\mathbf{k},\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})=4\pi\bar{\Phi}_F(\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})$.

Physically,

$$p(k) \equiv \sum_{\mathbf{K},\mathbf{kq}_2} |\bar{\varphi}(\mathbf{k},\mathbf{K},\mathbf{kq}_2)|^2 \tag{15}$$

is the isotropic probability distribution of wave vector $\mathbf{k}$ in the relative motion of the two $\uparrow$ and $\downarrow$ particles we are considering. We have found that its leading behavior for $k \to \infty$ is p_4/k^4, with

$$p_4 = (4\pi)^2 \sum_{\mathbf{K},\mathbf{kq}_2} |\bar{\Phi}_F(\mathbf{K},\mathbf{kq}_2)|^2. \tag{16}$$

On the other hand, with respect to $\mathbf{k}'$ integration in expression (12), it is more convenient to go back to $\mathbf{r}$ space through $\Sigma_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \psi_F^*(k') = \psi(r)$, which gives a factor of $\psi(r)\bar{\Phi}_F^*(\mathbf{K},\{\mathbf{k}_2,\ldots\},\{\mathbf{q}_2,\ldots\})$. Since $\psi(r)$ is isotropic, we can perform explicitly the angular $\mathbf{r}$ integration $\int d\Omega_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sin(kr)/kr$. Finally, for expression (12), we are left with the calculation of $\int_0^{r_0} dr\, r \sin(kr)\psi(r)$. This r integration is easily performed, leading to

$$k\int_0^{r_0} dr\, r \sin(kr)\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) = 1 - \left[\left(1 - \frac{r_0}{a}\right)\cos(kr_0) + \frac{1}{ka}\sin(kr_0)\right] \equiv 1 - f(k,r_0). \tag{17}$$

We write now, with this result, the partial contribution E_{11k} to energy equation (7), coming from the term $m=n=1$ in Eq. (9) and where we retain only the $k^2/2\mu$ term in Eq. (10). We obtain

$$E_{11k} = -\frac{1}{2\mu}\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{k^2} p_4[1 - f(k,r_0)] = -\frac{1}{4\pi^2\mu}\int_0^{k_c} dk\, p_4 + \frac{p_4}{4\pi^2\mu}\int_0^{\infty} dk f(k,r_0). \tag{18}$$

In the first term in the right-hand side, we have put a cutoff k_c since this integral diverges when $k_c \to \infty$. This divergence will just compensate in the final result for the above-mentioned divergence in Eq. (8). Hence the global result will be convergent as expected.

If in the last integral of Eq. (18) we were setting $r_0=0$, we would get $f(k,r_0)=1$ and a divergent result. Instead this integral is perfectly convergent when we calculate it explicitly for $r_0 \neq 0$ and then take properly the $r_0 \to 0$ limit. Indeed we see that it is not divergent because $f(k,r_0)$ involves oscillatory functions. The $\cos(kr_0)$ term merely gives a result proportional to $\delta(r_0)$, where $\delta(x)$ is the Dirac distribution. Since $r_0 \neq 0$ the contribution of this $\cos(kr_0)$ term is zero. On the other hand, owing to

$$\int_0^{\infty} dx \frac{\sin x}{x} = \frac{\pi}{2}, \tag{19}$$

the $\sin(kr_0)$ term gives a contribution $\pi/2a$ to the integral, leading to a contribution $p_4/8\pi\mu a$ to E_{11k}. As we have mentioned above, we could improve the presentation of our handling of the k integration, to deal with perfectly defined integrals, by introducing a convergence factor $\exp(-\eta k)$ and then let $\eta \to 0_+$. Physically this would correspond to regularization of the wave function in the $r \to 0$ limit. This would confirm our above results.

We have not yet taken into account the $K^2/2M$ term in Eq. (10), because there is no singular behavior associated with it. The corresponding contribution E_{11K} of the term $m=n=1$ in Eq. (9) goes to zero as $r_0 \to 0$, as it is obvious directly and can be checked by following the same procedure as above. Finally one sees easily that for all the other kinetic-energy terms $(1/2m_\uparrow)\Sigma_{m=2}^{n_\uparrow} k_m^2 + (1/2m_\downarrow)\Sigma_{n=2}^{n_\downarrow} q_n^2$ in the bracket of Eq. (7), the contribution from the term $m=n=1$ in Eq. (9) also goes to zero when $r_0 \to 0$. Hence the total contribution E_{11} of the $m=n=1$ term is merely $E_{11}=E_{11k}$.

We rewrite now the sum E_{11} in terms of the variables corresponding to particles $\uparrow$ and $\downarrow$, instead of the relative and center-of-mass variables. We have

$$E_{11} = -\frac{1}{2\mu}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{K}} \frac{P_4(\mathbf{K})}{k^2} + \frac{p_4}{8\pi\mu a}, \tag{20}$$

with again a cutoff k_c understood for the summation over $\mathbf{k}$, and where we have introduced

$$P_4(\mathbf{K}) = (4\pi)^2 \sum_{\mathbf{kq}_2} |\bar{\Phi}_F(\mathbf{K},\mathbf{kq}_2)|^2 \tag{21}$$

related to p_4 by $p_4 = \Sigma_{\mathbf{K}} P_4(\mathbf{K})$. With $1/\mu = 1/m_\uparrow + 1/m_\downarrow$, we have

$$E_{11} = -\frac{1}{2m_\uparrow}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{K}} \frac{P_4(\mathbf{K})}{k^2} - \frac{1}{2m_\downarrow}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{K}} \frac{P_4(\mathbf{K})}{k^2} + \frac{p_4}{8\pi\mu a}. \tag{22}$$

We make use of Eq. (10) to go back to the $\mathbf{k}_1$ and $\mathbf{q}_1$ variables. In the first term we change the summation variables from $\{\mathbf{K},\mathbf{k}\}$ to $\{\mathbf{K},\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + (m_\uparrow/M)\mathbf{K}\}$, making use of $d\mathbf{k}d\mathbf{K} = d\mathbf{k}_1 d\mathbf{K}$. In particular we have $1/k^2 = 1/[\mathbf{k}_1 - (m_\uparrow/M)\mathbf{K}]^2$. However we can use the identity

$$\int d\mathbf{r}\left[\frac{1}{(\mathbf{r}-\mathbf{A})^2} - \frac{1}{(\mathbf{r}+\mathbf{A})^2}\right] = 0, \tag{23}$$

where $\mathbf{A}$ is any fixed vector (this result is obvious by changing $\mathbf{r}$ into $-\mathbf{r}$), to write $\Sigma_{\mathbf{k}_1}[1/k^2 - 1/k_1^2] = 0$ at fixed $\mathbf{K}$. Proceeding in the same way with the second term of Eq. (22), we obtain

$$E_{11} = -\frac{1}{2m_\uparrow}\sum_{\mathbf{k}_1} \frac{p_4}{k_1^2} - \frac{1}{2m_\downarrow}\sum_{\mathbf{q}_1} \frac{p_4}{q_1^2} + \frac{p_4}{8\pi\mu a}, \tag{24}$$

with a cutoff k_c understood for the summation over $\mathbf{k}_1$ and $\mathbf{q}_1$.

In conclusion we have calculated all the contributions coming from the presence of the term $m=n=1$ in Eq. (9). These are just the three terms, proportional to p_4, in Eq. (24). To summarize, for the expression of the energy, we are back to Eq. (7) with the restriction $|\mathbf{r}_1 - \rho_1| > r_0$ removed, and the above three p_4 terms added.

We have just to repeat the same argument for all the other restrictions $|\mathbf{r}_i-\rho_j|>r_0$. In this way we obtain $n_\uparrow n_\downarrow$ analogous p_4 terms, which are naturally all equivalent after a change of variables. Taking Eq. (8) into account, this leads to the final expression for the energy:

$$E=\frac{1}{2m_\uparrow}\sum_{\mathbf{k}}\left[k^2n_\uparrow(k)-\frac{n_4}{k^2}\right]+\frac{1}{2m_\downarrow}\sum_{\mathbf{q}}\left[q^2n_\downarrow(q)-\frac{n_4}{q^2}\right]+\frac{n_4}{8\pi\mu a}, \tag{25}$$

where $n_4=n_\uparrow n_\downarrow p_4=\lim_{k\to\infty}k^4n_\uparrow(k)=\lim_{k\to\infty}k^4n_\downarrow(k)$. Indeed, from Eq. (6), $n_\uparrow(k)$ and $n_\downarrow(k)$ behave in this way for large k since, for example, $\mathbf{k}_1$ scatters with all the $\mathbf{q}_j$, and each scattering brings a contribution p_4/k^4. That is, any of the $n_\uparrow$ particles scatters with any of the $n_\downarrow$ particles. Hence the summations in Eq. (25) are perfectly convergent. This formula is the simple generalization of the formula found by Tan [3] to the case where the two species of involved particles have different masses.

In this derivation we introduced a cutoff to manipulate separately each contribution. This makes an easier presentation for the derivation. However this is just a convenience. We could avoid it by handling all the terms simultaneously. The presentation would be much awkward, but we would only deal with well-defined convergent integrals, without any need for a cutoff.

III. SIMPLE GENERALIZATIONS

It is first worthwhile to note that the above derivation did not make use of the statistics of the particles. Hence the result is valid for bosons as well as for fermions. Naturally it is artificial for bosons to consider only scattering between different species, although it might just happen that this scattering is the dominant one. Nevertheless for bosons there is no reason to exclude scattering between particles belonging to the same species. If we consider first the case of a single bosonic species, with n particles of mass m in the unit volume and with scattering length a, we can follow the same procedure as in Sec. II. We can write the equivalent of Eq. (7) for a single species, with a restriction $|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|>r_0$ working now between any of the $n(n-1)/2$ couples of particles. Taking care of the restrictions in the same way as in Sec. II, we end up with

$$E=\frac{1}{2m}\sum_{\mathbf{k}}\left[k^2n(k)-\frac{n_4}{k^2}\right]+\frac{n_4}{8\pi ma}, \tag{26}$$

with $n_4=n(n-1)p_4=\lim_{k\to\infty}k^4n(k)$. We note that the physics associated with the Efimov effect [10] does not appear explicitly in this result because, as we have argued in Sec. II below Eq. (3), three-body effects have not to be considered directly in our derivation which applies to the dilute limit $r_0\to 0$. However Efimov physics could still appear indirectly through its effect on the many-body wave function, from which $n(k)$ and n_4 have to be calculated.

We can then generalize this result to any mixture of N boson species with n_i particles of mass m_i in the unit volume $(i=1,\ldots,N)$ and interaction between species i and j characterized by scattering lengths a_{ij}. We find in the same way

$$E=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m_i}\sum_{\mathbf{k}}\left[k^2n_i(k)-\frac{n_{4i}}{k^2}\right]+\frac{1}{16\pi}\sum_{i,j}\frac{n_{4ij}}{\mu_{ij}a_{ij}}, \tag{27}$$

where $\mu_{ij}=m_im_j/(m_i+m_j)$ is the reduced mass for the i-j scattering, $n_{4i}=\lim_{k\to\infty}k^4n_i(k)$, and $n_{4i}=\Sigma_j n_{4ij}$. Naturally the formula is more complex for these mixtures, since it requires the knowledge of the $N(N+1)/2$ constants $n_{4ij}=n_{4ji}$ associated with the i-j scattering. The same result works for ultracold fermionic mixtures, except that we have to set $n_{4ii}=0$ because of Pauli principle.

IV. 2D CASE

While in one-dimensional (1D) situations the kinetic energy converges, and indeed in exact solutions of many-body problems the energy is precisely calculated by evaluating the kinetic energy, there is in two dimensions a divergence analogous to the three-dimensional (3D) case, except that the divergence is logarithmic in the 2D case. We show here how the procedure followed in three dimensions can be extended to this 2D case. Actually there is not so much difference since the space dimensionality does not appear in the principle of the procedure. The changes appear only when one comes to practical matters. We keep the same notations for the variables, but naturally we have to deal now with two-dimensional variables and integrations.

First the expression of the wave function $\psi(r)$ for the relative motion at small distance $r>r_0$ is modified into $\psi(r)\equiv\ln(a/r)$, which is solution of the 2D equation $\Delta\psi(r)=0$. The length a for which $\psi(a)=0$ plays the role of the scattering length and is naturally obtained from the interaction potential. The Fourier transform of $\psi(r)$ is $\psi_F(k)=2\pi/k^2$, omitting the irrelevant Fourier transform of $\ln a$. Similarly the large-k behavior of $p(k)$ is p_4/k^4, with $(2\pi)^2$ appearing in Eq. (16) instead of $(4\pi)^2$. Then the 2D angular integration gives $\int_0^{2\pi}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}=2\pi J_0(kr)$, where $J_0(x)$ is the first kind Bessel function. Hence, instead of Eq. (18), we obtain

$$E_{11k}=-\frac{p_4}{2\mu}\int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\int_0^{r_0}drr\ln\frac{a}{r}J_0(kr)=-\frac{p_4}{4\pi\mu}\int_0^{k_c}\frac{dk}{k}\int_0^{kr_0}dxx\ln\frac{ka}{x}J_0(x), \tag{28}$$

where in the last expression we have changed to the variable $x=kr$, and we have naturally to take the cutoff $k_c\to\infty$ at the end of the calculation, when the standard kinetic-energy term is included, as we have done in Sec. II. The logarithmic divergence arising in this standard term is expected to be compensated for by the contributions of all the terms similar to Eq. (28). Indeed, integrating by parts, we have

$$\int_0^{k_c}\frac{dk}{k}\int_0^{kr_0}dxx\ln xJ_0(x)=\left[\ln k\int_0^{kr_0}dxx\ln xJ_0(x)\right]_0^{k_c}-r_0^2\int_0^{k_c}dkk\ln k\ln(kr_0)J_0(kr_0). \tag{29}$$

To evaluate the first term we use [11] (when the integral is not absolutely convergent, we define it as above with an exponential convergence factor, with an extremely weak decreasing behavior)

$$\int_0^{\infty}dxx^{\mu}J_0(x)=2^{\mu}\frac{\Gamma\left(\frac{1+\mu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\mu}{2}\right)} \tag{30}$$

[where $\Gamma(x)$ is the standard Euler gamma function] together with $\ln x=\lim_{\epsilon\to 0}(x^{\epsilon}-1)/\epsilon$. Note in particular that $\int_0^{\infty}dxxJ_0(x)=0$. This gives $\int_0^{\infty}dxx\ln xJ_0(x)=-1$, which is also consistent with the fact that the Fourier transform of $\ln r$ is $-(2\pi)/k^2$. Hence we find indeed that Eq. (29) provides the required compensating term to avoid a divergent result. The other terms lead to constants, so we may take immediately in their expression the limit $k_c\to\infty$. First, except for the prefactor $-p_4/(4\pi\mu)$, the factor of $\ln a$ in the second term of the integral in Eq. (28) is

$$\int_0^{\infty}\frac{dk}{k}\int_0^{kr_0}dxxJ_0(x)=\int_0^{\infty}\frac{dy}{y}\int_0^{y}dxxJ_0(x)=-\int_0^{\infty}dyy\ln yJ_0(y)=1 \tag{31}$$

by the change of variable $y=kr_0$ and by integrating by parts. This means that the divergent contribution of the second term in Eq. (28) is proportional to $\ln(k_ca)$, as could be expected from dimensional analysis.

Finally in Eq. (28) we have still a contribution proportional to $\ln k$,

$$-\int_0^{\infty}\frac{dk}{k}\ln k\int_0^{kr_0}dxxJ_0(x)=\frac{r_0^2}{2}\int_0^{\infty}dkk\ln^2 kJ_0(kr_0), \tag{32}$$

again by integrating by parts. Gathering this term and the second term in Eq. (29), we have

$$-r_0^2\int_0^{\infty}dkk\ln k\ln(kr_0)J_0(kr_0)+\frac{r_0^2}{2}\int_0^{\infty}dkk\ln^2 kJ_0(kr_0)=-\frac{1}{2}\int_0^{\infty}d(kr_0)(kr_0)\ln^2(kr_0)J_0(kr_0), \tag{33}$$

where in the last step for the term proportional to $\ln^2 r_0$, we have used again $\int_0^{\infty}dxxJ_0(x)=0$. The remaining integral is calculated again by making use of Eq. (30) and is found to be $(1/2)\int_0^{\infty}dxx\ln^2 xJ_0(x)=C-\ln 2\simeq -0.116$, where $C=0.577\,216\cdots$ is the Euler constant. Gathering the above results we obtain

$$E_{11k}=-\frac{p_4}{4\pi\mu}\ln(k_ca)+p_4\frac{\ln 2-C}{4\pi\mu}. \tag{34}$$

Finally, just as for the 3D case, we want to go back to the variables corresponding to particles $\uparrow$ and $\downarrow$. It may be seen that this does not lead to additional contributions. This leads us finally to

$$E=\frac{1}{2m_{\uparrow}}\lim_{k_c\to\infty}\left[\sum_{\mathbf{k}}^{k<k_c}k^2n_{\uparrow}(k)-\frac{n_4}{2\pi}\ln(k_ca)\right]+\frac{1}{2m_{\downarrow}}\lim_{q_c\to\infty}\left[\sum_{\mathbf{q}}^{q<q_c}q^2n_{\downarrow}(q)-\frac{n_4}{2\pi}\ln(q_ca)\right]+n_4\frac{\ln 2-C}{4\pi\mu}, \tag{35}$$

where we recall that $n_4=n_{\uparrow}n_{\downarrow}p_4=\lim_{k\to\infty}k^4n_{\uparrow}(k)=\lim_{k\to\infty}k^4n_{\downarrow}(k)$. This result can be checked explicitly in the molecular case (see Appendix A).

V. FIELD-THEORETIC APPROACH

Let us see now how the above expression for the energy arises in the field-theoretic formalism. To be specific we will restrict ourselves for simplicity to the case of major interest, namely, the one of two fermionic species with equal populations, so that $n_{\uparrow}(k)=n_{\downarrow}(k)\equiv n(k)$. Since all the $\uparrow$ and $\downarrow$ quantities are equal, we do not write explicitly this index. We consider also the nonzero-temperature case since it does not make any problem. We deal first with the case of a normal system, and then extend the results to the superfluid case.

A. Normal state

We consider first the large-k dependence of $n(k)$. For free fermions at temperature T, the density distribution has an exponential tail proportional to $e^{-k^2/2mT}$. However, as pointed out in Ref. [5], interactions modify this behavior and give rise on general grounds to a $1/k^4$ dependence which dominates the exponential tail. This is explicit in the weak-coupling domain where the interaction can be treated perturbatively and the scattering length a is small, as was done by Belyakov [4] at zero temperature:

$$n(k)=\left(\frac{2}{3\pi}k_Fa\right)^2\frac{k_F^4}{k^4}, \tag{36}$$

where k_F is the Fermi momentum, $n_{\uparrow}=n_{\downarrow}=k_F^3/6\pi^2$.

In the general case the distribution $n(k)$ is obtained from the temperature Green's function $G(\mathbf{k},i\omega_n)$, where $\omega_n=(2n+1)\pi T$ (with n as an integer and $k_B=1$) is the Matsubara frequency, by

$$n(k)=T\sum_n G(\mathbf{k},i\omega_n)e^{i\omega_n\tau}, \tag{37}$$

where $\tau\to 0_+$. We separate out in this equation the free-particle contribution by writing the Dyson equation:

$$G(\mathbf{k},i\omega_n) = G_0(\mathbf{k},i\omega_n) + G_0(\mathbf{k},i\omega_n)\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)G(\mathbf{k},i\omega_n), \tag{38}$$

where G_0 is the free-particle Green's function $G_0(\mathbf{k},i\omega_n) = [i\omega_n - \epsilon_\mathbf{k} + \mu]^{-1}$, with $\epsilon_\mathbf{k} = k^2/2m$ as the free-particle kinetic energy, and $\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)$ as the self-energy. The first term in Eq. (38) gives in Eq. (37) the free-particle contribution, namely, the Fermi distribution. For large k its exponential tail mentioned above is completely dominated by the algebraic decay $1/k^4$ that we will obtain. Hence we are left only with the second term. For large k, implying a large kinetic energy for the particle, we expect the effect of interaction to be small in the same spirit as the Born approximation in this regime. Since $\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)$ describes this effect we expect it to be small. Hence we may to lowest order replace in this second term G with G_0. On the other hand we replace, in a standard way [12], the summation over Matsubara frequencies by a frequency integration over a contour $\mathcal{C}$ encircling the imaginary axis in the anticlockwise direction. This leads to the following expression for the dominant contribution to $n(k)$ at large k:

$$n(k) = -\frac{1}{2i\pi}\int_\mathcal{C} d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)\frac{\Sigma(\mathbf{k},\omega)}{(\omega - \epsilon_k + \mu)^2}, \tag{39}$$

where $f(x) = 1/(e^x + 1)$ is the Fermi distribution function. The contour can be deformed into the sum of a contour enclosing the positive frequency Re $\omega > 0$ half plane and another contour enclosing the negative frequency Re $\omega < 0$ half plane, both being in the clockwise direction. Closing the contour at infinity in the Re $\omega > 0$ half plane is allowed by the presence of the Fermi distribution $f(\omega/T)$, and closing it at infinity in the Re $\omega < 0$ half plane by the presence of the $e^{\omega\tau}$ factor, which is then omitted since it does not play any other role.

Now contributions from the double pole at $\omega = \epsilon_k - \mu$ will contain from the Fermi distribution a factor of $e^{-k^2/2mT}$ which makes them negligible. Similarly $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ has also singularities with frequencies which are large and positive, when k is large. The Fermi distribution $f(\omega/T)$ will again make their contribution exponentially small. On the other hand, as shown in detail in Appendix B, $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ has a pole at $\omega \simeq -\epsilon_k$ for large k, that is, deep in the Re $\omega < 0$ half plane. Roughly speaking this pole appears since a $\uparrow$ particle with large $\mathbf{k}$ and ω will scatter with a $\downarrow$ particle with essentially opposite parameters $-\mathbf{k}$ and $-\omega$. This happens because, just as in Sec. II the large values occur for the relative motion, but not for the center-of-mass motion. Then the $\downarrow$ particle propagator has a pole at $\omega \simeq -\epsilon_k$, which produces a pole for $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ at the same frequency.

For this pole, we have merely $(\omega - \epsilon_k + \mu)^2 \simeq (2\epsilon_k)^2 = k^4/m^2$ and $f(-\epsilon_k/T) \simeq 1$. If we call R_Σ the corresponding residue of $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$, we obtain in this way

$$n(k) \simeq m^2 R_\Sigma \frac{1}{k^4}. \tag{40}$$

Hence we see that the $1/k^4$ dependence of $n(k)$ at large k emerges quite naturally in this approach. We note that our analysis may seem inconsistent, since we have first argued that $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ should be small for large k, but then considered a pole of $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$, in the vicinity of which it is large. The justification is that as long as the contour is far away from the pole, $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ is indeed small everywhere on the contour. Making use of the pole is then a convenient way to calculate the contour integral.

We consider now the expression of the energy. It can be written in terms of the Green's function by a standard formula [12] which bears from the start a strong analogy with the expression found by Tan [3]:

$$E = T\sum_{\mathbf{k},n} (i\omega_n + \mu + \epsilon_k)G(\mathbf{k},i\omega_n)e^{i\omega_n\tau}, \tag{41}$$

where again $\tau \to 0_+$. This equation includes an overall factor of 2, coming from summation over spin. The essence of this formula is that calculating $i\omega_n G(\mathbf{k},i\omega_n)$ by Heisenberg equations of motion, one finds $E_c + 2E_{\text{int}}$, that is, the kinetic energy E_c plus twice the interaction energy E_{int}. Adding the kinetic energy E_c, which gives the ϵ_k term in Eq. (41), leads to $2E = 2(E_c + E_{\text{int}})$. In practice Eq. (41) is not so useful since one has to deal carefully with the divergent behavior occurring for large ω_n and large k, which is quite painful numerically. In this respect number equation (37) is much more convenient.

Now, to single out clearly the kinetic-energy contribution, we can rewrite Eq. (41) as

$$E = 2T\sum_{\mathbf{k},n} \epsilon_k G(\mathbf{k},i\omega_n)e^{i\omega_n\tau} + T\sum_{\mathbf{k},n} (i\omega_n + \mu - \epsilon_k)G(\mathbf{k},i\omega_n)e^{i\omega_n\tau}. \tag{42}$$

The first term is just the kinetic energy $E_c = 2\Sigma_\mathbf{k}\epsilon_k n(k)$. In the second term, which is just E_{int}, we can again replace the Matsubara frequency summation by the same contour integrals as above. Moreover the quantity appearing in this summation is just $G_0^{-1}(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega) = 1 + \Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega)$. However the term 1 gives a zero contribution to these closed contour integrals. Hence we are left with

$$E = E_c - \frac{1}{2i\pi}\sum_\mathbf{k}\int_\mathcal{C} d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega). \tag{43}$$

We can now analyze the behavior of the interaction energy term for large k, as we have done above for the particle number. In this range $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ is small so we may replace $G(\mathbf{k},\omega)$ with $G_0(\mathbf{k},\omega)$. Hence we have to deal with the same expression as in Eq. (36), except that $G_0(\mathbf{k},\omega)$ is not squared. Following the same arguments we obtain for large k

$$-\frac{1}{2i\pi}\int_\mathcal{C} d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega) \simeq -\frac{mR_\Sigma}{k^2}. \tag{44}$$

Hence we have shown explicitly that the large-k behavior of the interaction energy comes in to cancel the divergent behavior of the kinetic energy. Naturally this is the expected result. Accordingly we may write

$$E = 2\sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{k^2}{2m} n(k) - \frac{mR_\Sigma}{2k^2} \right] + \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{mR_\Sigma}{k^2} - \frac{1}{2i\pi} \int_C d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right) \Sigma(\mathbf{k},\omega) G(\mathbf{k},\omega) \right], \tag{45}$$

where, from Eqs. (40) and (44), both brackets give convergent integrals for large k. The first term is just the kinetic energy from which, according to Eq. (40), the large-k behavior has been subtracted. By comparison with Eq. (25), the second term in Eq. (45) is just $mR_\Sigma/4\pi a$, a result by no means obvious.

B. Numerical calculations in the ladder approximation

We are now in a situation where we can calculate the energy from three different formulas, as we explain just below. For the exact theory they would naturally give the same result. However if we use an approximate scheme, the results are expected to be different. The differences can, in some rough way, be seen as a measure of the errors resulting from the approximation. Hence it is of interest to make such a comparison.

Specifically we have taken as an example the ladder approximation [13,14] at unitarity and we have performed numerical calculations of the energy as a function of temperature in this approximation. The ladder approximation has been used in variety of contexts, in particular for high-T_c superconductivity [13]. In the context of ultracold gases, with a short-range potential, it has been used both in the normal state and in the superfluid state (using its natural extension in this regime). In all cases it has proved to be a quite reasonable approximation both qualitatively and quantitatively. In the normal state it can be checked [14] to give in a number of different limiting situations the exact results known from other calculations. In the superfluid state it has been shown to give results in quite good agreement with experiments [15] and it has been checked [16] that for the equation of state, it is again in fairly good agreement with results obtained from Monte Carlo calculations as well as from experiments.

We use three different ways to obtain the energy. Our first expression for the energy is the general one [Eqs. (43) and (45)]. The second one is the energy formula found by Tan [3], that is, Eq. (25), with equal masses. Finally we use the noninteracting gas scaling relation $E=-(3/2)\ \Omega$ between the grand potential Ω and the energy E, which is also valid at unitarity [17] due to the lack of any microscopic energy scale. We calculate the grand potential itself via the density $n(\mu,T)$ [obtained by integration of $n(k)$] using the thermodynamic relation $\Omega(\mu,T)/V=-\int_{-\infty}^{\mu} d\mu' n(\mu',T)$. (We have used the fact that Ω goes to 0 in the high-temperature regime $\mu/T\to-\infty$.) As noted above this last method is much more convenient numerically than the two others, since there are no convergence problems for large k in the $\mathbf{k}$ summation.

The results of these numerical calculations are shown in Fig. 1. We have checked that we recover the proper high-temperature behavior (virial expansion) with the three methods, as it should be. This common evolution toward the virial result is clearer in the inset, where the results are shown with an extended scale, but this convergence is fairly slow. The results of the three methods are fairly close, which is coherent with the fact that we expect the ladder approximation to be reasonably good, mostly toward higher temperatures. Indeed at lower temperature the differences between the three results grow, mostly for the result of the Tan formula. This is clearly due to the proximity of the superfluid critical temperature, which occurs at $T/T_F \simeq 0.243$ in this approximation.

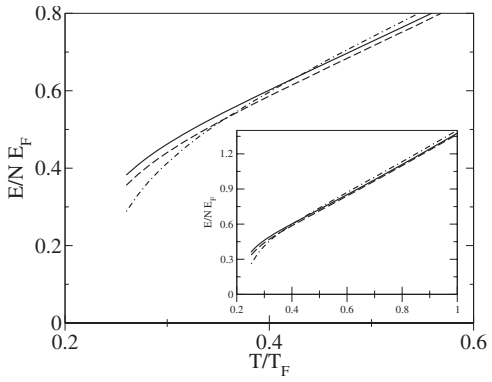


FIG. 1. Energy of the gas at unitarity as a function of reduced temperature, obtained from Eq. (45) (dashed line), Eq. (25) (dashed-dotted line), and from the scaling relation (full line) $E=-(3/2)\ \Omega$, with the grand potential Ω obtained by integrating the particle density. The inset shows the results with an extended scale.

The major numerical problem with the use of Eq. (25) is obtaining the proper coefficient of $1/k^4$ in the large-momentum behavior of $n(k)$. This requires in particular to be sure that the asymptotic regime is reached numerically. The same problem arises in Eq. (45) since one must find numerically that for large k, the kinetic energy is exactly balanced by the interaction energy. In the present case of the ladder approximation, we can check that the asymptotic regime has been reached since we have analytical expressions. In order to check numerically this large-momentum behavior of the contributions coming into the two brackets of Eq. (45), we have performed, as we indicate specifically below, an expansion of the occupation number $n(k)$ and of the interaction energy term up to orders k^{-6} and k^{-4}.

As indicated in Sec. V A the self-energy is small in the large-momentum and -frequency limit and we can expand the Green's function in powers of the self-energy. Hence we have for the occupation number and the interaction energy term the following:

$$n(k) = -\frac{1}{2\pi i} \int_C d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right) [G_0(\mathbf{k},\omega) + G_0(\mathbf{k},\omega)\Sigma(\mathbf{k},\omega)G_0(\mathbf{k},\omega) + O(\Sigma^2)] \tag{46}$$

$$-\frac{1}{2\pi i}\int_C d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega)$$
$$=-\frac{1}{2\pi i}\int_C d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)[\Sigma(\mathbf{k},\omega)G_0(\mathbf{k},\omega)+O(\Sigma^2)]. \quad (47)$$

We start from Eq. (B1) and following the arguments given above and detailed in Appendix B, we neglect the contribution coming from the pole of the Green's function, which gives exponentially small terms, and we only consider the contribution from the cut of the vertex $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$ on the real-frequency axis. Following [14], we call this self-energy contribution Σ_Γ:

$$\Sigma_\Gamma(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{\pi}\sum_{\mathbf{K}}\int_{\Omega_{\min}}^{\infty}d\Omega b\left(\frac{\Omega}{T}\right)\mathrm{Im}\,\Gamma(\mathbf{K},\Omega+i\epsilon)$$
$$\times G_0(\mathbf{K}-\mathbf{k},\Omega-\omega) \quad (48)$$

with $\Omega_{\min}=\frac{K^2}{4m}-2\mu$, and $\epsilon\to 0_+$.

The Bose distribution effectively limits the frequency Ω to be at most a few T and the K integral is therefore effectively bounded. Similarly to what is done in Appendix B, we consider the singularities of the self-energy located at $\omega\approx-\epsilon_{\mathbf{k}}$. In the large-momentum $\mathbf{k}$ and large-frequency ω limit, we expand the free Green's function in Eq. (48) in powers of $(\omega+\epsilon_{\mathbf{k}}+\mu)^{-1}$, leading to

$$\Sigma_\Gamma(k,\omega)=\sum_{p=0}^{\infty}\frac{C_p(k)}{(\omega+\epsilon_{\mathbf{k}}+\mu)^{p+1}}, \quad (49)$$

where

$$C_p(k)=-\frac{1}{\pi}\sum_{\mathbf{K}}\int_{\Omega_{\min}}^{\infty}d\Omega b\left(\frac{\Omega}{T}\right)\mathrm{Im}\,\Gamma(\mathbf{K},\Omega+\epsilon)$$
$$\times\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{K}}{m}+\Omega-\frac{K^2}{2m}+2\mu\right)^p. \quad (50)$$

In this limit, the contribution to the self-energy due to the cut of the vertex $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$ is a sum of poles of order $p+1$ located at $\omega=-\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu$. In Eq. (46), only the second term is of interest, since the first one gives the Fermi distribution which does not contribute to the algebraic tail. So we use expansion (49) in Eq. (46) and find the following expansion for large wave vector k:

$$n(k)\simeq-\frac{1}{2\pi i}\int_C d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)[G_0(\mathbf{k},\omega)]^2\Sigma(\mathbf{k},\omega)$$
$$\simeq\sum_{p=0}^{\infty}(p+1)\frac{C_p(k)}{(k^2/m)^{p+2}}. \quad (51)$$

The first three terms of this expansion give the dominant contribution. Indeed, it is easily checked that the term of order Σ^2 in Eq. (46) give contributions at least of order k^{-8}. C_0 does not depend on $\mathbf{k}$, while the $\mathbf{k}$ dependence of C_1 vanishes after angular integration. For the coefficient C_2 we can write $C_2(k)=A_2\frac{k^2}{m}+B_2$. Finally we find for the particle distribution in the large-momentum limit:

$$n(k)=C_0\frac{m^2}{k^4}+(2C_1+3A_2)\frac{m^3}{k^6}+O\left(\frac{m^4}{k^8}\right). \quad (52)$$

Comparing with Eq. (40) we see that C_0 is identical to the coefficient R_Σ defined in Sec. V A. We have checked the numerical convergence in the large-k limit by comparing the second term in our expansion (52) with our numerical results. The coefficients are identical with a precision of less than 1%.

We can perform the same analysis for the interaction energy term in Eq. (47) and we find the following expansion:

$$-\frac{1}{2\pi i}\int_C d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega)$$
$$=-C_0\frac{m}{k^2}-(C_1+A_2)\frac{m^2}{k^4}+O\left(\frac{m^3}{k^6}\right). \quad (53)$$

Here also we have checked the numerical convergence with a precision of less than 1%.

C. Superfluid state

Compared to the normal state, we have now to modify Dyson equation (38) to take into account [12] the anomalous self-energy $\Delta(\mathbf{k},i\omega_n)$ and the anomalous propagator $F^+(\mathbf{k},i\omega_n)$. We have

$$G(\mathbf{k},i\omega_n)=G_0(\mathbf{k},i\omega_n)+G_0(\mathbf{k},i\omega_n)\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)G(\mathbf{k},i\omega_n)$$
$$+G_0(\mathbf{k},i\omega_n)\Delta(\mathbf{k},i\omega_n)F^+(\mathbf{k},i\omega_n), \quad (54)$$

$$F^+(\mathbf{k},i\omega_n)=G_0(-\mathbf{k},-i\omega_n)\Sigma(-\mathbf{k},-i\omega_n)F^+(p)$$
$$-G_0(-\mathbf{k},-i\omega_n)\Delta^*(\mathbf{k},i\omega_n)G(\mathbf{k},i\omega_n). \quad (55)$$

Again for large k, we have to lowest order $G(\mathbf{k},i\omega_n)\simeq G_0(\mathbf{k},i\omega_n)$ and $\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)$ small. For such a large k we expect this normal self-energy $\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)$ to behave as in the normal state, discussed in Sec. V B. On the other hand the anomalous self-energy is expected to go to a constant, without any singular behavior. This implies from Eq. (55) that $F^+(\mathbf{k},i\omega_n)$ is small. In this case the first term in the right-hand side of Eq. (55) is negligible and from the second term we have

$$F^+(\mathbf{k},i\omega_n)\simeq-G_0(-\mathbf{k},-i\omega_n)\Delta^*(\mathbf{k},i\omega_n)G_0(\mathbf{k},i\omega_n). \quad (56)$$

Substitution into Eq. (54) gives

$$G(\mathbf{k},i\omega_n)\simeq G_0(\mathbf{k},i\omega_n)+G_0^2(\mathbf{k},i\omega_n)[\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)$$
$$-G_0(-\mathbf{k},-i\omega_n)|\Delta(\mathbf{k},i\omega_n)|^2]. \quad (57)$$

Hence, in addition to the pole at $\omega\approx-\epsilon_k$ coming as discussed above in $\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)$, the last term gives also a pole at the same place from the explicit factor $G_0(-\mathbf{k},-i\omega_n)$. This leads to the large-k behavior:

$$n(k) \simeq m^2[R_\Sigma + |\Delta_\infty|^2]\frac{1}{k^4}, \tag{58}$$

where $\Delta_\infty = \lim_{k\to\infty} \Delta(\mathbf{k}, -\epsilon_k)$. Actually the additional term is well known in the case of BCS theory which gives indeed, with standard notations, $n_k = v_k^2 = (1/2)(1-\xi_k/E_k) \simeq m^2\Delta^2/k^4$ for large k.

Going now to the expression for the energy, there is naturally no modification in Eq. (42). On the other hand we have now, in the second term of Eq. (42) involving $G_0^{-1}G$, to make use of the appropriate Dyson equation (54). This leads, instead of Eq. (43), to

$$E = E_c - \frac{1}{2i\pi}\sum_{\mathbf{k}} \int_{\mathcal{C}} d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)[\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega) + \Delta(\mathbf{k},i\omega)F^+(\mathbf{k},i\omega)]. \tag{59}$$

Now the large-k analysis goes essentially as in the normal state, and is similar to the one for the particle distribution since there is only a factor of G_0 which is different in the two calculations. This factor leads to a factor of $-k^2/m$ in the present case, compared to the particle distribution. That is, we have for large k

$$-\frac{1}{2i\pi}\int_{\mathcal{C}} d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)[\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega) + \Delta(\mathbf{k},i\omega)F^+(\mathbf{k},i\omega)] \simeq -m[R_\Sigma + |\Delta_\infty|^2]\frac{1}{k^2}, \tag{60}$$

and the generalization of Eq. (45) is

$$E = 2\sum_{\mathbf{k}}\left[\frac{k^2}{2m}n(k) - \frac{m[R_\Sigma + |\Delta_\infty|^2]}{2k^2}\right] + \sum_{\mathbf{k}}\left[\frac{m[R_\Sigma + |\Delta_\infty|^2]}{k^2} - \frac{1}{2i\pi}\int_{\mathcal{C}} d\omega f\left(\frac{\omega}{T}\right)[\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega) + \Delta(\mathbf{k},i\omega)F^+(\mathbf{k},i\omega)]\right]. \tag{61}$$

VI. CONCLUSION

In this paper we have investigated the large-momentum algebraic tail in the particle distribution and the energy formula found by Tan [3] associated with this tail. We have provided a simple derivation of this energy formula, which rests on the fact that in evaluating this energy for the short-range potential under consideration, the interaction energy contribution is zero in most of phase space, which makes it negligible. Hence only the kinetic energy has to be calculated. The basis of the derivation is the careful subtraction of the kinetic-energy-divergent contribution for interparticle distance less than the potential range. This derivation is easily generalized to particles with different masses, to arbitrary mixtures, and to two-dimensional space. We have then shown how the algebraic tail arises naturally in the field-theoretic many-body approach, from the analytic structure of the self-energy. Making use of these ingredients we have shown how, starting from a standard general expression of the energy in terms of the Green's function, one obtains a formula with a kinetic-energy part which has the same structure as in the formula found by Tan. This has been done both in the normal and in the superfluid state. Finally we have taken the various exact formulas allowing to obtain the energy, and we have compared in the normal state at unitarity the resulting numerical values obtained within the ladder approximation.

Note added in proof. We have recently learned that S. Tan has also considered the two-dimensional case [19].

ACKNOWLEDGMENTS

We are quite grateful to L. Tarruell and C. Salomon for discussions. Laboratoire de Physique Statistique de l'Ecole Normale Supérieure is "associé au Centre National de la Recherche Scientifique et aux Université Pierre et Marie Curie–Paris 6 et Université Paris Diderot–Paris 7." We are also very grateful to D. d'Humières and N. Regnault for their recurring help in numerical matters.

APPENDIX A: LIMITING CASES

In the BEC limit $a \to 0_+$, one is led to consider the problem of a single molecule. The normalized wave function is $\psi(r) = (2\pi a)^{-1/2}e^{-r/a}/r$ and the density distribution is given by the square of its Fourier transform $n_\uparrow(k) = n_\downarrow(k) = 8\pi a^{-1}/(k^2 + a^{-2})^2$. The coefficient of the k^{-4} tail is $n_4 = 8\pi a^{-1}$. One checks that indeed the energy $E = 2\Sigma_k(k^2/2m)[n(k) - n_4/k^4] + n_4/(4\pi ma) = -1/ma^2$ gives the proper binding energy $E_b = 1/ma^2$.

In the weak-coupling limit $a \to 0_-$ the energy (per unit volume) can be expanded in powers of $k_F a$ (the contributions which would come from BCS pairing are exponentially negligible). To second order [12],

$$E = n\frac{k_F^2}{m}\left[\frac{3}{10} + \frac{k_F a}{3\pi} + b_2(k_F a)^2\right], \tag{A1}$$

where $n = k_F^3/3\pi^2$ and $b_2 = 2(11 - 2\log 2)/35\pi^2 \simeq 0.055\,661\,3$. Second-order perturbation gives also

$$n_\uparrow(k) = n_\downarrow(k) = \theta(k_F - k) + (k_F a)^2\tilde{n}^{(2)}(k/k_F), \tag{A2}$$

where $n^{(2)}(k)$ is a lengthy analytical expression given in Refs. [4,18]. For large k, $(k_F a)^2\tilde{n}^{(2)}(k/k_F) \simeq n_4^{(2)}/k^4$, with $n_4^{(2)} = (2k_F^3 a/3\pi)^2$. Since there is no first-order correction to the density distribution, the first-order correction to the energy, in energy relation (25), is merely given by the last explicit term, $n_4^{(2)}/4\pi ma = \pi a n^2/m$, which coincides indeed with the (mean-field) first-order term in Eq. (A1).

To check this relation to second order, we need the coefficient $n_4^{(3)}$ of the tail in the third-order contribution $(k_F a)^3\tilde{n}^{(3)}(k/k_F)$ to the density distribution, which is not available. However we can extract it from the adiabatic relation [5,7,9] $n_4 = 4\pi m a^2(dE/da)$, which gives $n_4^{(3)} = 8\pi b_2 n k_F^4 a^3$. Hence we have to check that

$$2\sum_k \frac{k^2}{2m}\left[(k_F a)^2 \tilde{n}^{(2)}\left(\frac{k}{k_F}\right) - \left(\frac{2k_F^3 a}{3\pi}\right)^2 \frac{1}{k^4}\right] + \frac{2b_2 n k_F^4 a^2}{m} = b_2 n \frac{k_F^2}{m}(k_F a)^2, \tag{A3}$$

which implies

$$\int_0^\infty dx\left[x^4 \tilde{n}^{(2)}(x) - \frac{4}{9\pi^2}\right] = -\frac{2}{3}b_2. \tag{A4}$$

We have checked numerically this equation with a seven-digit precision corresponding to all the digits given above for b_2.

Finally in the 2D case, in the BEC limit, one has again a single-molecule problem. The normalized wave function of the bound state with energy $E=-1/2\mu\alpha^2$ is $\psi(r)=(\alpha\sqrt{\pi})^{-1}K_0(r/\alpha)$. For small x the Bessel function $K_0(x)\simeq \ln(2e^{-C}/x)$, so that $a=2\alpha e^{-C}$. The density distribution is $n_\uparrow(k)=n_\downarrow(k)=4\pi\alpha^2/[1+(k\alpha)^2]^2$, so that $n_4=4\pi/\alpha^2$. With these ingredients Eq. (35) is easily checked.

APPENDIX B: ANALYTIC STRUCTURE OF THE SELF-ENERGY

We discuss here in detail the analytic structure of $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ in order to justify the assumptions we have made above in Sec. V A. It is useful to consider first the case of the ladder approximation [12,14], where the structure is explicit. In this case the self-energy is given by

$$\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n) = T\sum_{\mathbf{K},\nu}\Gamma(\mathbf{K},i\omega_\nu)G_0(\mathbf{K}-\mathbf{k},i\omega_\nu - i\omega_n) = \frac{1}{2i\pi}\int_{\mathcal{C}} d\Omega b\left(\frac{\Omega}{T}\right)\sum_{\mathbf{K}}\Gamma(\mathbf{K},\Omega)G_0(\mathbf{K}-\mathbf{k},\Omega - i\omega_n), \tag{B1}$$

where in the last step we have replaced the summation over bosonic Matsubara frequencies $\omega_\nu=2\pi\nu T$, with ν as an integer, by an integral over the contour $\mathcal{C}$ introduced above, and with $b(x)=1/(e^x-1)$ as the Bose distribution function. The vertex $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$ is given by

$$\Gamma^{-1}(\mathbf{K},\Omega) = \frac{m}{4\pi a} + \sum_{\mathbf{k}'}\left[T\sum_m G_{0\uparrow}(\mathbf{k}',i\omega_m)G_{0\downarrow} \times(\mathbf{K}-\mathbf{k}',\Omega - i\omega_m) - \frac{1}{2\epsilon_{k'}}\right]. \tag{B2}$$

Deforming contour $\mathcal{C}$ as we have done in Sec. V A, we will from Eq. (B1) express $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ in terms of the singularities of $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$ and of $G_0(\mathbf{k},\omega)$, which are on the real-frequency axis. On one hand $G_0(\mathbf{k},\omega)$ has a simple pole at $\omega+\mu=\epsilon_k$. On the other hand the singularities of $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$ correspond first to the continuum of scattering states with energy $\Omega+2\mu=\epsilon_{\mathbf{k}'}+\epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}'}\geq K^2/4m$, arising from the product of the two G_0 in Eq. (B2). In addition there is the possibility of a bound state of the two particles, corresponding to a zero of the right-hand side of Eq. (B2). As a result the spectrum of these singularities has some lower bound $\Omega_{\min}$. On the other hand for large K their frequencies are bounded from below by $\Omega\approx K^2/4m$, corresponding to the kinetic energy of the mass center.

Now let us first consider the contribution from the pole of $G_0(\mathbf{K}-\mathbf{k},\Omega-i\omega_n)$ in Eq. (B1), located at $\Omega=i\omega_n+\epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}-\mu$. The Bose factor $b(\Omega/T)$ will produce a factor $f(\epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}/T)$, which for large k implies an exponentially small factor of $e^{-k^2/2mT}$. This makes the corresponding contribution to the self-energy irrelevant for the algebraic tail of n_k. The only way to avoid this is to have also a large $\mathbf{K}\approx\mathbf{k}$, so $\epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}$ is not large. However in this case we will obtain a factor $\Gamma(\mathbf{K},i\omega_n+\epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}-\mu)$. The singularities of $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ we are looking for are obtained from this factor by continuing the imaginary frequency $i\omega_n$ to the real-ω axis. However we know that when K is large, the singularities of $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$ are located at large frequencies on the order of $K^2/4m$. This implies that the corresponding singularities of $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ will be for $\omega+\epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}-\mu\approx K^2/4m\approx k^2/4m$, that is, $\omega\approx k^2/4m$ since $\epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}$ is not large. As explained below Eq. (37) these large-ω singularities in $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ give only exponentially small contributions to n_k and again do not come in the k^{-4} tail we are looking for. Hence we conclude that the pole of G_0 in Eq. (B1) gives no contribution to this tail, which comes accordingly only from the contribution of $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$.

For this contribution the dependence of $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ on frequency comes explicitly from the G_0 term, and it has poles for $\omega=\Omega-\epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}+\mu$. Here Ω runs over the frequencies of the singularities of $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$, but in practice the Bose factor limits them to some finite range $\Omega\lesssim T$. This implies in particular that K is bounded (just as above the terms produced by the tail of the Bose factor will necessarily have an exponential factor and do not contribute to the algebraic tail of n_k). Hence, for large $k\to\infty$, we obtain from the G_0 term a single pole located at $\omega\approx -k^2/2m$. The corresponding residue is, from Eq. (B1),

$$R_\Sigma = -\frac{1}{2i\pi}\sum_{\mathbf{K}}\int_{\mathcal{C}_\Gamma} d\Omega b\left(\frac{\Omega}{T}\right)\Gamma(\mathbf{K},\Omega) = -\frac{1}{\pi}\sum_{\mathbf{K}}\int_{\Omega_{\min}}^\infty d\Omega b\left(\frac{\Omega}{T}\right)\mathrm{Im}\,\Gamma(\mathbf{K},\Omega+i\epsilon), \tag{B3}$$

where $\mathcal{C}_\Gamma$ is a clockwise contour enclosing only the singularities of $\Gamma(\mathbf{K},\Omega)$ and the last expression (with $\epsilon\to 0_+$) is the real-axis integral obtained by calculating the contour integral from the jump of the imaginary part of Γ across the real-frequency axis.

Let us consider now the general situation where no approximation is made. Actually, provided we replace the bare propagator G_0 with the full propagator G, Eq. (B1) remains valid. We have

$$\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n) = T\sum_{\mathbf{K},\nu}\gamma(\mathbf{K},i\omega_\nu;\mathbf{k},i\omega_n)G(\mathbf{K}-\mathbf{k},i\omega_\nu - i\omega_n) = \frac{1}{2i\pi}\int_{\mathcal{C}} d\Omega b\left(\frac{\Omega}{T}\right)\sum_{\mathbf{K}}\gamma(\mathbf{K},\Omega;\mathbf{k},i\omega_n) \times G(\mathbf{K}-\mathbf{k},\Omega - i\omega_n). \tag{B4}$$

Indeed, considering the self-energy of, say, the $\uparrow$ particle, there will be in any diagram a first interaction with a $\downarrow$ particle, hence correspondingly a $G_\downarrow$ factor. Merely isolating this factor and gathering the rest into γ produces Eq. (B4). We may express γ in terms of the standard [12] full vertex $\tilde{\Gamma}$ by isolating the Hartree term in the self-energy. This gives, for a contact interaction,

$$\gamma(K;k) = g - gT\sum_{k'} G_\uparrow(k')G_\downarrow(K-k')\tilde{\Gamma}(k',K-k';k,K-k), \tag{B5}$$

where we have used a four-vector notation $k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_n)$. Here the coupling constant g is related to the scattering length a and to the cutoff k_c, related to the contact interaction, by $g^{-1} = m_r/(2\pi a) - \Sigma^{k_c} 2m_r/k^2$.

Physically $\gamma(\mathbf{K}, i\omega_\nu; \mathbf{k}, i\omega_n)$ describes the scattering of two particles k and $K-k$, and accordingly it will have the same qualitative properties as we have discussed above for $\Gamma(\mathbf{K}, \Omega)$ (where we have been quite general for purpose). We consider the contributions in Eq. (B4) from the singularities of G. Either $\mathbf{K}$ is small compared to $\mathbf{k}$, so $\mathbf{K}-\mathbf{k}$ is large and we can replace G with G_0, and as above we will have an exponential factor coming from the Bose factor, or $\mathbf{K}$ is comparable to $\mathbf{k}$, in which case the corresponding singularities of γ will start around $K^2/4m$ and the resulting singularities for $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ will be at least $\omega \approx k^2/4m$, which makes them irrelevant for the algebraic tail of n_k.

Hence we have only to consider the contributions of the singularities of γ in the calculation of Eq. (B4). Again those with large $\mathbf{K}$ (i.e., with small $\mathbf{K}-\mathbf{k}$) will be located at high frequency Ω, and the Bose factor produces an exponential factor which makes them irrelevant. We are left only with contributions arising for $\mathbf{K}$ small compared to $\mathbf{k}$, in which case G can again be replaced by G_0. This produces for $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ an explicit pole at $\omega \approx -k^2/2m$, with a residue

$$R_\Sigma = -\frac{1}{2i\pi}\sum_{\mathbf{K}} \int_{\mathcal{C}_\Gamma} d\Omega b\left(\frac{\Omega}{T}\right)\gamma\left(\mathbf{K}, \Omega; \mathbf{k}, -\frac{k^2}{2m}\right). \tag{B6}$$

Actually it seems physically reasonable that in the large-$\mathbf{k}$ limit, $\gamma(\mathbf{K}, \Omega; \mathbf{k}, -k^2/2m)$ depends only on $(\mathbf{K}, \Omega)$. Indeed this limit corresponds to a short-range scattering between two $\uparrow$ and $\downarrow$ particles. In this case, in a way analogous to the one discussed in Sec. II for the energy formula, this scattering should be essentially described by two-body physics. The situation is then similar to the one found in the ladder approximation. The k dependence is just the one which is already explicit, and we are left with a constant for the residue, given by a formula such as Eq. (B3) with a modified $\Gamma(\mathbf{K}, \Omega)$.

[1] For a very recent review, see S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).
[2] R. Casalbuoni and G. Nardulli, Rev. Mod. Phys. **76**, 263 (2004).
[3] S. Tan, Ann. Phys. (N.Y.) **323**, 2952 (2008).
[4] V. A. Belyakov, Sov. Phys. JETP **13**, 850 (1961).
[5] E. Braaten and L. Platter, Phys. Rev. Lett. **100**, 205301 (2008).
[6] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1985).
[7] S. Tan, Ann. Phys. (N.Y.) **323**, 2971 (2008).
[8] F. Werner, L. Tarruell, and Y. Castin, Eur. Phys. J. B **68**, 401 (2009).
[9] S. Zhang and A. J. Leggett, Phys. Rev. A **79**, 023601 (2009); we had been aware of this paper when our work was essentially completed.
[10] V. Efimov, Phys. Lett. **33B**, 563 (1970); E. Braaten and H. W. Hammer, Phys. Rep. **428**, 259 (2006).
[11] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic, New York, 1980).
[12] For an introduction to many-body techniques and superconductivity, see, for example, A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, New York, 1975); and A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
[13] A. Perali, P. Pieri, G. C. Strinati, and C. Castellani, Phys. Rev. B **66**, 024510 (2002).
[14] R. Combescot, X. Leyronas, and M. Yu. Kagan, Phys. Rev. A **73**, 023618 (2006), and references therein.
[15] A. Perali, P. Pieri, L. Pisani, and G. C. Strinati, Phys. Rev. Lett. **92**, 220404 (2004).
[16] A. Perali, P. Pieri, and G. C. Strinati, Phys. Rev. Lett. **93**, 100404 (2004).
[17] T. L. Ho, Phys. Rev. Lett. **92**, 090402 (2004).
[18] R. Sartor and C. Mahaux, Phys. Rev. C **21**, 1546 (1980).
[19] S. Tan, e-print arXiv:cond-mat/0505615.

Equation of state of a polarized Fermi gas in the Bose-Einstein-condensate limit

F. Alzetto and X. Leyronas
Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, UPMC Paris 06, Université Paris Diderot, CNRS, 24 rue Lhomond, F-75005 Paris, France
(Received 17 November 2009; published 8 April 2010)

We present a theoretical study of the BEC-BCS crossover in the Bose-Einstein-condensate (BEC) regime in the case of an unequal number of fermions of two species. We take full account of the composite nature of the dimers made of fermions. In the limit of low densities, we calculate the ground-state energy of the system, or equivalently the chemical potentials of each species, as well as the one-particle gap and the energy of an "impurity" immersed in a Fermi sea. For the chemical potentials we go up to order $(\text{density})^{4/3}$. The results found involve the exact atom-dimer a_{AD} and dimer-dimer a_{DD} scattering lengths and therefore include the three- and four-body problems in the many-body problem. We briefly comment on the importance of the different mean-field corrections for recent experiments.

DOI: 10.1103/PhysRevA.81.043604 PACS number(s): 03.75.Hh, 03.75.Ss, 67.85.Pq

I. INTRODUCTION

The problem of a Bose-Fermi mixture in the Bose-Einstein-condensate (BEC) limit of the BEC-BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) crossover has been studied experimentally recently [1]. Previous theoretical works studied the zero-temperature phase diagram using a mean-field approach [2] or Monte Carlo simulations [3]. The BEC limit has been investigated theoretically in Refs. [4,5] or by using a functional integral formalism [6]. In Ref. [4], the authors used a Bogoliubov–de Gennes approach in order to derive in an elegant way a Gross-Pitaevskii equation for the condensate wave function. They found a dimer-dimer scattering length and an atom-dimer scattering length equal to *two* times the atom-atom scattering length a and $8/3a$, respectively. Then they gave some reasonable diagrammatic arguments in order to recover the correct scattering lengths. As far as the equation of state of the system is concerned, these calculations stopped at the mean-field level (where the chemical potentials depend linearly on the densities). On the other hand, researchers had studied previously [7,8] a mixture of pointlike bosons and fermions at zero temperature in the dilute limit. There the equation of state was determined including a lowest-order mean-field correction. This is the main result of the present work, to recover this result for the problem of a mixture of fermions and composite bosons relevant to experiment of Ref. [1].

In this work we determine the equation of state at zero temperature of a mixture of fermions of two species. We consider a *dilute* situation where the densities of both species n_1 and n_2 (hereafter denoted *density*) are small but are of the same order. We thus have density $\times\, a^3 \ll 1$, and we expand the chemical potentials of fermions up to order $(\text{density})^{4/3}$.

For a reader mainly interested in the results and not so much in technical details, the main results of our work (the equations of state) are shown in Eqs. (51), (54), and (55).

In Sec. II, we recall the general formalism of fermionic superfluids (anomalous Green's functions, anomalous self-energy, and the so-called generalized self-energies). In Sec. III, we describe the general framework of the theory, namely, how we expand the number and gap equations in powers of the atomic density. In Sec. IV, the lowest-order density expansion is deduced, while the derivation of the next order correction is shown in Sec. V. The one-particle gap and the problem of a single atom immersed in the Fermi sea of atoms of the other species are determined in Sec. VI. In Sec. VII, we conclude and comment on the relevance of our calculation for recent experiments of Ref. [1].

II. GENERAL FORMALISM

In a fermionic superfluid, the usual field-theoretical methods must be modified in order to take into account the off-diagonal order [9]. In practice, one has to consider "anomalous" Green's functions $F(p)$ and $F^+(p)$ (which are physically the propagators of condensed pairs). The Dyson equations for the fermionic superfluid are

$$G_1(p) = G_1^0(p) + G_1^0(p)\Sigma_1(p)G_1(p) + G_1^0(p)\Delta(p)F^+(p) \tag{1}$$

for the propagator of particles of type 1 (and similarly for particles of type 2) and

$$F^+(p) = G_2^0(-p)\Sigma_2(-p)F^+(p) - G_2^0(-p)\Delta^*(p)G_1(p) \tag{2}$$

for the anomalous Green's function $F^+(p)$. These two equations have a simple diagrammatical meaning (see Fig. 1): The self-energy $\Sigma_1(p)$ is the sum of all diagrams with one incoming $(p,1)$ line [a $G_1^0(p)$ Green's function] and one outgoing $(p,1)$ line, which cannot be separated into two disconnected parts by cutting a $(p,1)$ line or a $(-p,2)$ line [a $G_2^0(-p)$ Green's function]. The anomalous self-energy $\Delta(p)$ is the sum of all diagrams with one incoming $(p,1)$ line and one incoming $(-p,2)$ line, which cannot be separated into two disconnected parts by cutting a $(p,1)$ line or a $(-p,2)$ line. The anomalous Green's function $F^+(p)$ starts diagrammatically with one outgoing $(-p,2)$ line and finishes with one outgoing $(p,1)$ line.

In Ref. [10], the so-called generalized self-energy $S_1(p)$ was introduced. It is defined by the equation

$$G_1(p) = \frac{1}{\left[G_1^0(p)\right]^{-1} - S_1(p)}, \tag{3}$$

 ©2010 The American Physical Society

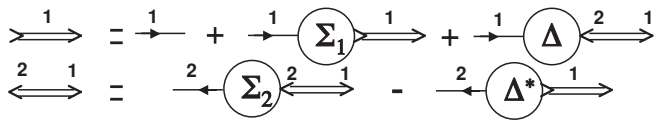


FIG. 1. The Dyson equations [Eqs. (1) and (2)] in diagrammatic language. The numbers 1 and 2 specify the atomic species.

which can be rewritten $G_1(p) = G_1^0(p) + G_1^0(p)S_1(p)G_1^0(p) + G_1^0(p)S_1(p)G_1^0(p)S_1(p)G_1^0(p) + \cdots$. Diagrammatically, this means that $S_1(p)$ is the sum of all diagrams with one incoming $(p,1)$ line and one outgoing $(p,1)$ line which cannot be disconnected into two parts by cutting a $(p,1)$ line. It is natural to use the generalized self-energy, since it is the only thing one needs in order to calculate the one particle Green's function $G_1(p)$ [whereas one needs both $\Sigma_1(p)$ *and* $\Delta(p)$] and therefore the density of fermions of species 1. Moreover, as it was shown in Ref. [10], the generalized self-energy is directly related to the dimer-atom T matrix (hereafter denoted T_3, as we see in Sec. IV), whereas $\Sigma_1(p)$ is not. This makes the use of the generalized self-energy convenient for getting more compact expressions.

III. NUMBER AND GAP EQUATIONS

The system we study is an ensemble of two distinct "species" of fermions. There are n_1 (respectively n_2) fermions per unit volume of type 1 and mass m_1 (respectively type 2 and mass m_2). These two species can be either two internal states (for instance, two hyperfine states of ^{6}Li) and in this case $m_1 = m_2$ or two different sort of fermions (a ^{6}Li-^{40}K mixture for instance). Due to the extremely low temperature and Pauli exclusion principle, there is no intraspecies interaction. The short-range interspecies interaction is therefore described by the scattering length a (for a review, see Ref. [11]). In the limit we consider, we have $a > 0$ and there is a two-body bound state (a molecule or dimer) of energy $E_b = -1/(2m_r a^2)$, where $m_r = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ is the particle 1-particle 2 reduced mass and we take in this work $\hbar = 1$. As pointed out by Pieri and Strinati [4], the limit of dilute condensed molecules with extra fermions of species 1 corresponds to a positive chemical potential μ_1 and a negative and large chemical potential (of order E_b) μ_2 for the fermions 2. Therefore, this is the limit we consider, too, and we take

$$\mu_1 > 0, \tag{4}$$

$$\mu_2 < 0, \tag{5}$$

and

$$\mu_1 + \mu_2 < 0. \tag{6}$$

The method is similar to the one used in Refs. [10] and [12], and is common to most of the studies of the BCS-BEC crossover [11]: We calculate the particles number n_1 and n_2 as functions of the chemical potentials μ_1 and μ_2 and a superfluid order parameter Δ; we write also a generalized "gap equation" for Δ as a function of μ_1 and μ_2. If we eliminate Δ from the equations, we get the equations of state $\mu_1(n_1,n_2)$ and $\mu_2(n_1,n_2)$. The results for these equations of state are shown in Eqs. (51), (54), and (55), which are the main results of the present work.

A. Number equations

In order to get the density of particle 1, we have to sum on k the propagator $G_1(k)$

$$n_1 = -\sum_k G_1(k)e^{i\omega_n 0^+}, \tag{7}$$

where we use the notation $\sum_k \equiv -\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} T \sum_n$ (in this article, we use the $T \neq 0$ formalism and then take the limit $T \to 0$). We have $G_1^0(k) = \frac{1}{(i\omega_n + \mu_1 - \mathbf{k}^2/2m_1)}$ with $k = \{\mathbf{k}, i\omega_n\}$, $\mu_1 > 0$, and $\omega_n = (2n+1)\pi T$ (with n integer). We have of course a similar result for the Green's function of atoms 2, with a chemical potential $\mu_2 < 0$. Following [10], the full Green's function $G_1(k)$ is related to the generalized self-energy $S_1(k)$ via a Dyson equation $G_1(k) = G_1^0(k) + G_1^0(k)S_1(k)G_1(k)$. $S_1(k)$ does not contain diagrams with a $G_1^0(k)$ propagator, but it does contains diagrams with $G_2^0(-k)$ propagators. If we iterate the Dyson equation, we get the approximation

$$G_1(k) \approx G_1^0(k) + \left[G_1^0(k)\right]^2 S_1(k). \tag{8}$$

As we explain later in this article, this approximation is good enough at the order we consider. It must be emphasized that the generalized self-energy contains anomalous contributions, as we see later in this article. Using the approximation Eq. (8), we get from the first term the contribution to the density (after taking the $T \to 0$ limit)

$$n_1^0 = \frac{k_0^3}{6\pi^2}, \tag{9}$$

where the wave vector k_0 is defined via

$$k_0 = \sqrt{2m_1\mu_1}. \tag{10}$$

If we define $\delta n_1 \equiv n_1 - n_1^0$, we get

$$\delta n_1 \approx -\sum_k \left[G_1^0(k)\right]^2 S_1(k). \tag{11}$$

We can proceed in the same way for the density of particles 2. In this case, we have $n_2^0 = 0$, since $\mu_2 < 0$. We therefore have

$$n_2 \approx -\sum_k \left[G_2^0(k)\right]^2 S_2(k), \tag{12}$$

where $S_2(k)$ is the generalized self-energy of the particles 2.

B. Gap equation

We follow Ref. [10] in order to get our gap equation. Looking at the diagrammatic expansion of the anomalous Green's function $F(k)$, we can, in general write

$$F(k) = G_1^0(k)G_2^0(-k)\left[\sum_{k_1} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)F(k_1)\right] + F'(k). \tag{13}$$

The first term in the right-hand side of Eq. (13) contains *all* the diagrams where the two incoming $(k,1)$ and $(-k,2)$ fermions lines first interact [interaction $V(\mathbf{q})$]. Therefore, $F'(k)$ is the sum of all the diagrams where the two incoming fermions

$(k,1)$ and $(-k,2)$ do *not* first interact. The term between large brackets in Eq. (13) is the usual BCS gap [10] $\delta_1(\mathbf{k})$,

$$\delta_1(\mathbf{k}) = \sum_{k_1} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)F(k_1). \tag{14}$$

We can eliminate the interaction V in favor of the two-body T matrix [10] at zero momentum $T_2(0)$,

$$[T_2(0)]^{-1} = \sum_k F'(k)/\Delta, \tag{15}$$

where Δ is the zero-wave-vector value of $\delta_1(\mathbf{k})$. As usual, T_2 is obtained by summing the ladder series and one finds easily

$$\begin{aligned} T_2(K)^{-1} &= g^{-1} - \Pi(K) \\ &= \frac{m_r}{2\pi}\left[a^{-1} - \sqrt{-2m_r\left(i\Omega_\nu + 2\mu - \frac{\mathbf{K}^2}{2m_\mathrm{D}}\right)}\right] \\ &\quad + R(K), \end{aligned} \tag{16}$$

where $K = \{\mathbf{K}, i\omega_\nu\}$, $\omega_\nu = 2\pi\nu T$ (ν integer). $m_\mathrm{D} = m_1 + m_2$ is the mass of a dimer and $2\mu = \mu_1 + \mu_2$ is the total chemical potential. $R(K)$ is due to the positive chemical potential μ_1:

$$R(K) = \int_{k<k_0} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\left[i\Omega_\nu + 2\mu - \frac{\mathbf{k}^2}{2m_1} - \frac{(\mathbf{K}-\mathbf{k})^2}{2m_2}\right]}. \tag{17}$$

This is due physically to the presence of the Fermi sea of the fermions in excess. We note that $T_2(K)$ is analytical for $\mathrm{Re}(i\omega_\nu) < 0$ [in many instances in this work, we find convenient to use the somewhat loose notation $g(i\omega_\nu)$ for the analytical continuation of a function g for $i\omega_\nu$ spanning the whole complex plane—not only the discrete Matsubara frequencies values]. The final gap equation reads

$$\frac{m_r}{2\pi}(a^{-1} - \sqrt{4m_r|\mu|}) = \left[\sum_k F'(k)/\Delta\right] - R(0), \tag{18}$$

with $R(0) = -\int_{k<k_0} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\mathbf{k}^2/2m_r + 2|\mu|)}$.

We define the bosonic chemical potential μ_B through the equation

$$\mu_1 + \mu_2 \equiv 2\mu \equiv -|E_b| + \mu_B, \tag{19}$$

and we can expand the left-hand side of Eq. (18) in the power of μ_B. In this way we get

$$\mu_B = Z\left\{\left[\sum_k F'(k)/\Delta\right] - R(0)\right\} + O\left(\mu_B^2\right), \tag{20}$$

where we have defined the residue of T_2 at the molecular pole

$$Z = \frac{2\pi}{(m_r)^2 a}. \tag{21}$$

In the following, we expand $F'(k)$, $S_1(k)$, and $S_2(k)$ in the power of Δ and k_0. We see that this corresponds to an expansion in the power of the density of the condensed dimer and of the fermions in excess, respectively.

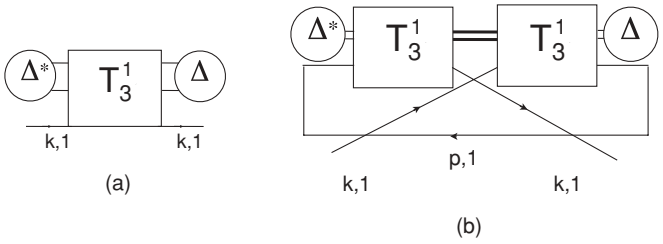


FIG. 2. Diagrammatic representation of $S_1^{(a)}(k)$ and $S_1^{(b)}(k)$.

IV. DENSITY EXPANSION: LOWEST ORDER

A. Number equations

We start with the calculation of $S_1(k)$. Diagrams without anomalous self-energy are diagrams in the normal phase. In this case, one has to close a fermionic loop for species 2. Going back to time representation, one sees that such contributions are zero, since the bare propagators of particles 2 are retarded, as is explained in detail in [10]. Physically, this comes from the fact that at $T = 0$, there are no "free" (i.e., not bound to a condensed molecule) fermion of species 2 which can interact with a fermion of species 1. The diagrams of lowest order in Δ (that is of lowest order in $\sqrt{n_2}$) are therefore those containing one Δ and one Δ^*. They are given in terms of the three-particle T matrix, with T_3^1 describing the scattering of a dimer with fermion of species 1 [see Fig. 2(a)]:

$$S_1^{(a)}(k) = \Delta|^2 T_3^1(k,k;k). \tag{22}$$

This diagram has a very simple physical meaning. An incoming fermion $k,1$ scatters with a condensed dimer (factor Δ^* for a dimer "out of" the condensate); the scattering of the dimer with the fermion is described by the dimer-atom 1 T matrix T_3^1. The right side of the diagram represents the outgoing fermion $k,1$ and the dimer which "goes back" to the condensate (factor Δ). The contribution to the density of particles 1 is $\delta n_1^{(a)} = -\sum_k e^{i\omega_n 0^+}[G_1^0(k)]^2|\Delta|^2 T_3^1(k,k;k)$. The frequency summation is written as usual as an integral on a contour encircling the imaginary axis counterclockwise: $T\sum_{i\omega_n}[G_1^0(k)]^2 T_3^1(k,k;k) = -\oint_C \frac{dz}{2\pi i} f(z)\frac{1}{(z-\xi_1)^2} T_3^1(k,k;k)$, with $f(z) = 1/(e^{z/T}+1)$ as the Fermi Dirac distribution and $\xi_{1,2} = \mathbf{k}^2/(2m_{1,2}) - \mu_{1,2}$ and $k = \{\mathbf{k}, z\}$. We use next the analytical properties of T_3 as a function of z. Following an argument given in [10], we can split T_3 into a first part $1/(z+\xi_2)$, which has a pole at $-\xi_2 < 0$, plus a function which is analytical for $\mathrm{Re}(z) < 0$. When we deform the contour in order to enclose the singularities, we see that the only singularities in $\mathrm{Re}(z) < 0$ are $-\xi_2$ and ξ_1 if $\xi_1 < 0$. Due to the exponential decay of the Fermi-Dirac distribution $f(z)$ for $\mathrm{Re}(z) < 0$ when the temperature goes to 0, the contour encircling the domain $\mathrm{Re}(z) > 0$ vanishes. We therefore find at zero temperature

$$\begin{aligned} T\sum_{i\omega_n} G_1^0(k)^2 T_3^1(k,k;k) &= \frac{f(-\xi_2)}{(\xi_1+\xi_2)^2} + \frac{df(\xi_1)}{dz} T_3^1(k,k;k) \\ &\quad + f(\xi_1)\frac{d}{dz} T_3^1(k,k;k), \end{aligned} \tag{23}$$

where the four-wave vector $k = \{\mathbf{k}, \xi_1\}$ is "on the shell." In order to compute the density, the next step is to integrate the

three terms on the right-hand side of Eq. (23) on the wave vector $\mathbf{k}$. We use the zero-temperature limits $\frac{df(\xi_1)}{dz} = -\delta(\xi_1)$, $f(\xi_1) = \Theta(k_0 - |\mathbf{k}|)$ [$\Theta(x)$ is the step function], and $f(-\xi_2) = 1$. The first term is simply $\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\mathbf{k}^2/2m_r + 2|\mu|)^2}$. However, anticipating the result, we can replace 2μ by the binding energy $E_b = -\frac{1}{2m_r a^2}$ plus terms of order (density). We find in this way that the contribution to $n_1/|\Delta|^2$ of the first term of Eq. (23) after summation on $\mathbf{k}$ is

$$\frac{(m_r)^2 a}{2\pi} = Z^{-1}. \tag{24}$$

For the second term of Eq. (23), due to the δ function, the integration gives a factor $N_0 = m_1 k_0/(2\pi^2)$, the density of state of excess fermions at energy μ_1 times (minus) $T_3^1(k,k;k)$ at $k = \{k_0,0\}$. Then we use Eq. (A7) of Appendix A in order to find T_3^1 up to order k_0. In this way the contribution to $\delta n_1^{(a)}/|\Delta|^2$ of the second term after summation on $\mathbf{k}$ is

$$-Z^{-1} N_0 g_{\mathrm{AD}} [1 + k_0 a_{\mathrm{AD}} (2\pi) F_{a,1}(1, m_{\mathrm{D}}/m_1)], \tag{25}$$

where we have introduced the dimer-particle 1 coupling strength $g_{\mathrm{AD}} = 2\pi a_{\mathrm{AD}}/m_{\mathrm{AD}}$, where $m_{\mathrm{AD}} = (m_1 m_{\mathrm{D}})/(m_1 + m_{\mathrm{D}})$ is the dimer-particle 1 reduced mass and a_{AD} is the dimer-fermion 1 scattering length. The function $F_{a,1}$ is defined in Eq. (A8) of Appendix A. Concerning the third term on the right-hand side of Eq. (23), we use the result of Eq. (B2) of Appendix B [$k = \{\mathbf{k}, z = (\mathbf{k}^2 - k_0^2)/2m_1\}$]:

$$\frac{d}{dz} T_3^1(k,k;k) = -Z^{-1} (g_{\mathrm{AD}} m_{\mathrm{AD}})^2 \frac{1}{k_0} F_{a,2}\left(\frac{|\mathbf{k}|}{k_0}, \frac{m_{\mathrm{D}}}{m_1}\right).$$

The function $F_{a,2}$ is defined in Eq. (B3) of Appendix B. After integration on $\mathbf{k}$, due to the occupation number $f(\xi_1) = \Theta(k_0 - |\mathbf{k}|)$, we find $\int_{|\mathbf{k}|<k_0} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d}{dz} T_3^1(k,k;k)$. If we rescale $\mathbf{k}$ by k_0 we find the contribution to $n_1/|\Delta|^2$ for the third term of Eq. (23):

$$-Z^{-1} g_{\mathrm{AD}} N_0 k_0 a_{\mathrm{AD}} \frac{m_{\mathrm{AD}}}{m_1} (4\pi^3) \int_{x<1} \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} F_{a,2}\left(x, \frac{m_{\mathrm{D}}}{m_1}\right). \tag{26}$$

We just have to multiply the three contributions of Eqs. (24), (25), and (26) by $|\Delta|^2$ in order to get the correction to the density of particles 1:

$$\delta n_1^{(a)} = \frac{|\Delta|^2}{Z} - N_0 \left(g_{\mathrm{AD}} \frac{|\Delta|^2}{Z}\right) [1 + k_0 a_{\mathrm{AD}} (C_{a,1} + C_{a,2})]. \tag{27}$$

The dimensionless constants $C_{a,1}$ and $C_{a,2}$ are given by $C_{a,1} = 2\pi F_{a,1}(1, m_{\mathrm{D}}/m_1)$ and $C_{a,2} = 4\pi^3 (m_{\mathrm{AD}}/m_1) \int \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \Theta(1 - x) F_{a,2}(x, m_{\mathrm{D}}/m_1)$.

Going to particles of species 2, we first have to consider the self-energy of the particles 2 in the normal phase. The situation is different for S_2 and S_1, since, due to the positive chemical potential μ_1, the particles 2 can interact with the Fermi sea of particles 1. This problem is related to the impurity problem, which has been the object of various works both experimentally [13] and theoretically [14]. In the normal phase, at lowest order in the density of particles 1, the self-energy is given by the so-called "ladder approximation,"

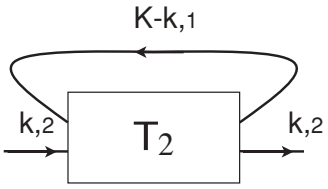


FIG. 3. Diagrammatic representation of $\Sigma_2^{(\mathrm{ladder})}(k)$.

which is shown diagrammatically in Fig. 3. Explicitly, it is written

$$\Sigma_2^{\mathrm{ladder}}(k) = -\sum_K T_2(K) G_1^0(K - k). \tag{28}$$

This gives the contribution to the density of particles 2 at lowest order:

$$\begin{aligned} n_2^{\mathrm{ladder}} &= -\sum_k \left[G_2^0(k)\right]^2 \Sigma_2^{\mathrm{ladder}}(k) \\ &= \sum_{k,K} \left[G_2^0(k)\right]^2 T_2(K) G_1^0(K - k). \end{aligned} \tag{29}$$

We can make the change of variables $p = K - k$ in the double summation: $n_2^{\mathrm{ladder}} = \sum_{k,p} [G_2^0(k)]^2 T_2(k + p) G_1^0(p)$. In this way, we see that the integrand is analytical for $\mathcal{R}e(i\omega_k) < 0$ and if we perform the frequency summation on $i\omega_k$, we get zero by deforming the frequency contour in the half-plane $\mathrm{Re}(i\omega_k) < 0$. We thus find

$$n_2^{\mathrm{ladder}} = 0. \tag{30}$$

We have also the contribution of the generalized self-energy due to the condensate of dimers, similar to Eq. (22) but for the particles 2 now:

$$S_2^{(a)}(k) = |\Delta|^2 T_3^2(k,k;k). \tag{31}$$

The contribution to the density of particles 2 is written using Eq. (12):

$$n_2^{(a)} = -\sum_k \left[G_2^0(k)\right]^2 S_2^{(a)}(k). \tag{32}$$

It is shown in Appendix C that at the order we consider we have [i.e., up to order $(\mathrm{density})^{5/3}$]

$$n_2^{(a)} = \frac{|\Delta|^2}{Z}. \tag{33}$$

Before closing this section, we notice that we could have written

$$S_2(k) \approx \Sigma_{\mathrm{ladder}}(k) + S_2^{(a)}(k) \tag{34}$$

and use Eq. (12) to calculate n_2.

B. Gap equation

We determine now the lowest-order contribution to $F'(k)$. We first have the contribution already found in Ref. [10] [see Fig. 4(a)]:

$$\frac{F'^{(a)}(k)}{\Delta} = \frac{1}{2} |\Delta|^2 G_1^0(k) G_2^0(-k) \Phi(k, -k; 0, 0). \tag{35}$$

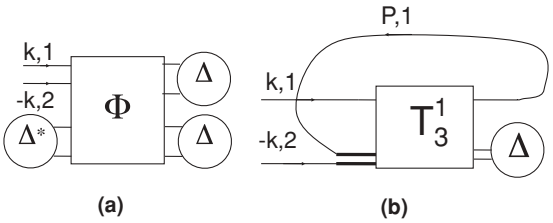


FIG. 4. The two contributions to $F'(k)$.

When $F'^{(a)}(k)$ is summed on k in the gap equation (20), we recover the dimer-dimer T matrix T_4:

$$\sum_k \frac{F'^{(a)}(k)}{\Delta} = \frac{1}{2} T_4(0,0;0,0)|\Delta|^2. \tag{36}$$

However, there is an other contribution to $F'(k)$ due to the presence of the Fermi sea of the extra 1 atoms, with one Δ and one hole propagator [see Fig. 4(b)]:

$$\frac{F'^{(b)}(k)}{\Delta} = -G_1^0(k)G_2^0(-k)\sum_p G_1^0(p)T_2(p-k)T_3^1(k,p;p). \tag{37}$$

Then $F'^{(b)}(k)$ is summed on k and the order of summations on k and p is exchanged. The summation on k (including the minus sign) is precisely the integral part in the integral equation for $T_3^1(p,p;p)$ [15]. Therefore, we have to substract the Born approximation term $-G_0^2(-p)$:

$$-\sum_k G_1^0(k)G_2^0(-k)T_2(p-k)T_3^1(k,p;p) = T_3^1(p,p;p) + G_2^0(-p).$$

In this way, we can transform the summation on k of Eq. (37) in a summation on p

$$\sum_k \frac{F'^{(b)}(k)}{\Delta} = \sum_p G_1^0(p)\left[T_3^1(p,p;p) + G_2^0(-p)\right]. \tag{38}$$

The quantity between brackets is analytical for $\mathrm{Re}(i\omega_p) < 0$. We can therefore perform the integration on $i\omega_p$ and close the contour in the half-plane $\mathrm{Re}(i\omega_p) < 0$. We pick the contribution of the pole of $G_1^0(p)$ when $|\mathbf{p}| < k_0$ and we get

$$\sum_k \frac{F'^{(b)}(k)}{\Delta} = \int_{p<k_0} \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\left[T_3^1(p,p;p) + G_2^0(-p)\right], \tag{39}$$

where p is on the shell $p = \{\mathbf{p}, (\mathbf{p}^2 - k_0^2)/2m_1\}$. The second term in the brackets of Eq. (39) is canceled by $-R(0)$ in the gap equation (20). Finally, we can write a final gap equation in terms of the bosonic chemical potential μ_B from Eqs. (20), (36), and (39),

$$\mu_B \approx Z\left[\frac{1}{2}T_4(0,0;0,0)|\Delta|^2 + \int_{p<k_0}\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}T_3^1(p,p;p)\right], \tag{40}$$

where we have omitted terms of order μ_B^2, that is, of the order of the square of density. We will see that this is sufficient at the order we consider.

We can express T_4 in terms of the dimer-dimer scattering length a_{DD} [15]. We have $T_4(0,0;0,0) = Z^{-2}(4\pi/m_{\mathrm{D}})(2a_{\mathrm{DD}})$. The dimer-dimer coupling constant is defined as usual by $g_{\mathrm{DD}} = (4\pi a_{\mathrm{DD}})/m_{\mathrm{D}}$. Moreover, we can use the expansion of Appendix A Eq. (A7) for $T_3^1(k,k;k)$ at lowest order: $T_3^1(k,k;k) \approx g_{\mathrm{AD}}/Z$. In this way, we can perform the integration on the wave vector $\mathbf{k}$ and we get the mean-field-like contributions $\mu_B = g_{\mathrm{DD}}(|\Delta|^2/Z) + g_{\mathrm{AD}}(k_0^3/6\pi^2)$. Using Eqs. (9) and (33), we find the bosonic chemical potential in terms of the densities

$$\mu_B = g_{\mathrm{DD}}n_2 + g_{\mathrm{AD}}(n_1 - n_2), \tag{41}$$

which is a result at linear order in density for the bosonic chemical potential μ_B defined in Eq. (19).

V. DENSITY EXPANSION: NEXT ORDER

In order to get a diagram for S_1 at next order in k_0, we include the possibility of having a hole line (therefore going backward in a diagram) in addition to one Δ and a Δ^*. Such a diagram is shown in Fig. 2(b). The arguments yielding these diagrams are given in Appendix D:

$$S_1^{(b)}(k) = |\Delta|^2\sum_p T_3^1(p,k;p)T_2(p-k)T_3^1(k,p;p)G_1^0(p). \tag{42}$$

In order to calculate $\delta n_1^{(b)} = -\sum_k [G_1^0(k)]^2 S_1^{(b)}(k)$, we need to perform two summations on the frequencies ω_k and ω_p. In the summation on ω_p, we use the fact that $T_3^1(p,k;p)$ $[= T_3^1(k,p;p)]$ (this is quite easily seen by writing the diagrammatic expansion where one sees that p always appears with a plus sign) and $T_2(p-k)$ are analytical for $\mathrm{Re}(i\omega_p) < 0$ and we perform the integration like in Eq. (23). By doing so, due to the analytical properties of $T_3^1(p,k;p)$ and $T_2(p-k)$ as a function of the frequency $i\omega_p$, we close the integration contour in $\mathrm{Re}(i\omega_p) < 0$ and we get a contribution of the pole of $G_1^0(p)$ for $|\mathbf{p}| < k_F$ and in this way we find that p is on the shell $[p = \{\mathbf{p}, (\mathbf{p}^2 - k_0^2)/2m_1\}]$. The summation on ω_k is also easily performed if we use the fact that $T_2(p-k)$ are analytical for $\mathrm{Re}(i\omega_k) > 0$. Like in Eq. (23), we get two terms due to the presence of a double pole in $[G_1^0(k)]^2$, and k is on the shell $[k = \{\mathbf{k}, (\mathbf{k}^2 - k_0^2)/2m_1\}]$. In the term with the derivative of the product $T_3^1(p,k;p)^2T_2(k-p)$, we see easily that the derivative of T_3^1 gives a finite term in the low-density limit (as can be seen easily using, for instance, the integral equation for T_3^1). $T_2(k-p)$ can be written as the product of the bosonic propagator which is singular at low energy and wave vector times a regular function at low energy. The derivative of $T_2(k-p)$ at low energy thus gives

$$\frac{\partial}{\partial i\omega_k}\left[\frac{Z}{\frac{\mathbf{p}^2-k_0^2}{2m_1} - i\omega_k - \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{k})^2}{2m_{\mathrm{D}}}}\right]_{i\omega_k = \frac{(\mathbf{k}^2-k_0^2)}{2m_1}} = \frac{Z}{\left[\frac{\mathbf{p}^2-\mathbf{k}^2}{2m_1} - i\omega_k - \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{k})^2}{2m_{\mathrm{D}}}\right]^2}. \tag{43}$$

We can now perform the integrations on the wave vectors $\mathbf{p}$ and $\mathbf{k}$. Like in Appendix A, it can be shown that the low-wave-vector domain is dominant and we get for the correction to the

density of particles 1

$$\delta n_1^{(b)} = -N_0 \left(g_{\rm AD} \frac{|\Delta|^2}{Z} \right) (k_0 a_{\rm AD})(C_b - C_{a,2}), \tag{44}$$

where the constant C_b is defined by

$$C_b = 4\pi \int \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta(1-|\mathbf{x}|)(r+1)}{[r(1-\mathbf{x}^2)+(\mathbf{u}-\mathbf{x})^2]}, \tag{45}$$

where $\mathbf{u}$ is any unitary vector. Finally, the total density of fermions of species 1 is given in terms of Δ and k_0 ($\equiv\sqrt{2m_1\mu_1}$) by the expansion

$$n_1 = \frac{|\Delta|^2}{Z} + \frac{k_0^3}{6\pi^2} - N_0 \left(g_{\rm AD} \frac{|\Delta|^2}{Z} \right) [1 + k_0 a_{\rm AD} C(m_{\rm D}/m_1)] + \cdots, \tag{46}$$

where the constant $C(m_{\rm D}/m_1) = C_{a,1} + C_b$. After calculation of the required integrals, one finds that C is given in terms of the function $f[(m_{\rm D}-m_1)/(m_{\rm D}+m_1)]$ given by Albus *et al.* [7]. Specifically, we find $\pi C(m_{\rm D}/m_1) = (4/3) f(\delta)$, where we have defined the dimensionless parameter

$$\delta \equiv \frac{(m_{\rm D}-m_1)}{(m_{\rm D}+m_1)} = \frac{m_2}{2m_1+m_2} \tag{47}$$

and we have

$$f(\delta) = \frac{3}{4}\frac{(\delta-1)}{\delta} + \frac{3(1+\delta)^2(1-\delta)}{8\delta^2} \ln\left(\frac{1+\delta}{1-\delta}\right). \tag{48}$$

For the particles 2, we find naturally that there is no contribution of diagrams similar to the one shown in Fig. 2(b) (but with the roles of particles 1 and 2 exchanged) because there is no hole for particles 2 at lowest order. The first term on the right-hand side of Eq. (46) is n_2 at the order we consider, due to Eq. (33). Moreover, we can rewrite Eq. (46) by considering it as a Taylor expansion, after replacing C by $4/(3\pi) f$,

$$n_1 - n_2 = \frac{\left(2m_1\left\{\mu_1 - g_{\rm AD} n_2\left[1 + \frac{4}{3\pi} k_F a_{\rm AD} f(\delta)\right]\right\}\right)^{3/2}}{6\pi^2}, \tag{49}$$

where we ignored terms of order (density)$^{5/3}$. At the order we consider, we have replaced $|\Delta|^2/Z$ with n_2 in the right-hand side of the equation and k_0 with Fermi wave vector k_F in the term in factor of f. The Fermi wave vector is defined in terms of the density of fermions in excess in the usual way:

$$k_F \equiv [6\pi^2(n_1-n_2)]^{1/3}. \tag{50}$$

Equation (49) is easily inverted and we find

$$\mu_1 = \frac{k_F^2}{2m_1} + g_{\rm AD} n_2 \left[1 + \frac{4 k_F a_{\rm AD}}{3\pi} f(\delta)\right]. \tag{51}$$

We can now easily calculate μ_2 using Eqs. (51) and (41). Indeed, we can follow [7] and use that $\mu_1 = [\partial(E/V)/\partial n_1]_{n_2}$, where E is the ground-state energy in a volume V. We integrate Eq. (51) as a function of n_1 for $n_1 \leqslant n_2$, keeping n_2 fixed. We get

$$\frac{E}{V} = E_B(n_2) + \int_{n_2}^{n_1} dn_1' \mu_1(n_1', n_2), \tag{52}$$

where $E_B(n_2)$ is a constant of integration. We see from this equation that it is the ground-state energy (per unit volume) of the system with an equal number of particles 1 and 2 ("unpolarized" situation). We know from [10] that it is given by the Lee-Huang-Yang (LHY) [16] expression. Inserting Eq. (51) into Eq. (52), we get, using the mean-field-like term of the LHY expression for $E_B(n_2)$ [the LHY beyond-mean-field correction is of order (density)$^{5/2}$, which we neglect at the order we consider],

$$\frac{E}{V} = -|E_b| n_2 + \frac{1}{2} g_{\rm DD}(n_2)^2 + \frac{3}{10}\frac{k_F^5}{m_1} + g_{\rm AD}(n_1-n_2) n_2 \left[1 + \frac{k_F a_{\rm AD}}{\pi} f(\delta)\right], \tag{53}$$

which is an expansion up to terms of order (density)$^{7/3}$. From this we can take the derivative with respect to n_2 and we find for the chemical potential of particules 2

$$\mu_2 = -|E_b| - \frac{k_F^2}{2m_1} + g_{\rm DD} n_2 + g_{\rm AD}(n_1 - 2n_2) + g_{\rm AD}\left[\frac{k_F a_{\rm AD} f(\delta)}{3\pi}(3n_1 - 7n_2)\right], \tag{54}$$

where we have included terms up to order (density)$^{4/3}$. The bosonic chemical potential $\mu_B \equiv \mu_1 + \mu_2 + |E_b|$ is then from Eqs. (51) and (54)

$$\mu_B = g_{\rm DD} n_2 + g_{\rm AD}(n_1 - n_2)\left[1 + \frac{k_F a_{\rm AD} f(\delta)}{\pi}\right]. \tag{55}$$

Looking at Eqs. (51) and (55), we find that we recover precisely at this order the result of Albus *et al.*'s [7] Eqs. (76) and (67), respectively, if we consider that there are n_2 dimers considered as pointlike bosons (mass $m_{\rm D}$) and $n_1 - n_2$ fermions (mass m_1). The boson-boson interaction is described by the scattering length $a_{\rm DD}$ and the fermion-bosons interaction is characterized by the scattering length $a_{\rm AD}$.

VI. IMPURITY PROBLEM AND ONE-PARTICLE GAP

For a system with N_1 particles 1 and N_2 particles 2, we denote the ground-state energy $E(N_1,N_2)$. A single particle 2 (an "impurity") immersed in a Fermi sea of particles 1 has an excitation energy

$$E(N_1,1) - E(N_1,0) = \mu_2(n_1, n_2 = 0). \tag{56}$$

In the BEC limit, this problem has been the subject of many studies recently, both experimentally [13] and theoretically [14]. From Eq. (54) with $n_2 = 0$, we find

$$\mu_2^{\rm imp} = -|E_b| - \frac{k_F^2}{2m_1} + g_{\rm AD} n_1 \left[1 + \frac{k_F a_{\rm AD} f(\delta)}{\pi}\right], \tag{57}$$

where $k_F \equiv (6\pi^2 n_1)^{1/3}$. This result, and also a next-order correction, was found by Mora and Chevy in Ref. [14].

The one-particle gap $\Delta_{\rm gap}$ is related to the ground-state energy via [11,17]:

$$\Delta_{\rm gap} = \tfrac{1}{2}[2E(N+1,N) - E(N+1,N+1) - E(N,N)] = \tfrac{1}{2}(\mu_1 - \mu_2). \tag{58}$$

From Eqs. (51) and (54), we find

$$\Delta_{\rm gap} = \tfrac{1}{2}[|E_b| + (2g_{\rm AD} - g_{\rm DD}) n_2], \tag{59}$$

a result given in Eq. (40) (for particles of equal masses) of Ref. [11].

VII. COMMENTS AND CONCLUSION

We have presented in this work a low-density expansion of the equation of state of a condensate of composite bosons made of two fermions of two different species, in the case where one of the two species is in excess. We have shown results of the expansion for the chemical potentials up to order (density)$^{4/3}$. However, there must be terms of the type of the LHY correction of order (density)$^{3/2}$ (more precisely of the type $n_2^{3/2}$ and most probably of type $n_1 n_2^{1/2}$). In order to see the quantitative importance of the LHY correction and the correction to μ_B given in Eq. (55), we calculate the ratio R between these two terms,

$$R = \frac{g_{\rm DD} n_2 \frac{32}{3\sqrt{\pi}} \left(n_2 a_{\rm DD}^3\right)^{1/2}}{g_{\rm AD}(n_1 - n_2) k_F a_{\rm AD} \frac{f(\delta)}{\pi}} = 0.258 \left(\frac{n_2}{n_F}\right)^{4/3} \sqrt{k_{F,b} a}, \tag{60}$$

with $n_F \equiv n_1 - n_2$ and $k_{F,b} \equiv (6\pi^2 n_2)^{1/3}$. We have taken $m_1 = m_2$, $a_{\rm DD}/a = 0.6$ [15,18], $a_{\rm AD}/a = 1.18$ [19] in order to get the numerical prefactor. In principle, for fermion densities of the same order of magnitude, the ratio n_2/n_F is of order 1, and the ratio R tends to 0 in the dilute limit $\sqrt{k_{F,b} a} \to 0$. However, in the experiment of Ref. [1], looking at Fig. 4(a), we estimate at the center of the trap $n_2/n_F \approx 8$ and $k_{F,b} a \approx 1$. This gives $R \approx 4.1$. Close to the edge of the bosonic cloud, if we estimate that the dimer density is divided by 2, this gives $\sqrt{k_{F,b} a} \approx 0.9$ and for a ratio $n_2/n_F \approx 4$, we find $R \approx 1.46$. From this order-of-magnitude estimate, we see that including the corrections of Eqs. (51), (54), and (55) for the equations of state (in addition to the LHY correction as it was done in Ref. [1]) should improve quantitatively the analysis of the experiment of Ref. [1].

ACKNOWLEDGMENTS

We thank F. Chevy, R. Combescot, C. Mora, P. Pieri, and G. C. Strinati for interesting discussions. F.A. thanks the CNRS for financial support.

APPENDIX A: CORRECTIONS TO T_3^1

We want first to determine at lowest order in the densities the difference $T_3^1(k,k;k) - T_{3,v}^1(0,0;0)$, where $k = \{\mathbf{k}, (\mathbf{k}^2 - k_0^2)/(2m_1)\}$ and $|\mathbf{k}| \ll a^{-1}$. $T_{3,v}^1$ is the dimer-atom 1 T matrix in vacuum. It is obtained from T_3^1 by setting μ_1 to 0 and μ_2 to $-|E_b|$. One can define in the same way $T_{2,v}$, G_1^v, and G_2^v. We write $T_3^1(k,k;k) - T_{3,v}^1(0,0;0) = [T_3^1(k,k;k) - T_{3,v}^1(k,k;k)] + [T_{3,v}^1(k,k;k) - T_{3,v}^1(0,0;0)]$, and we calculate the two differences between parentheses separately.

A. $T_3^1(k,k;k) - T_{3,v}^1(k,k;k)$

In order to calculate the first difference, we note that it comes from the fact that the fermionic propagators and the dimer propagator are different in vacuum and with $\mu_1 \neq 0$ and $\mu_2 \neq -|E_b|$. The principle of the method is therefore the following: We write $\Delta G_{1,2}(k) = G_{1,2}^0(k) - G_{1,2}^v(k)$, $\Delta T_2(K) = T_2(K) - T_{2,v}(K)$ and we expand the diagrammatic series for T_3^1 in powers of $\Delta G_{1,2}$ and ΔT_2. If we look at the diagrams for $T_3^1(k,k;k)$ with N dimer propagators T_2, we see that G_1^0 appears N times in $G_0^1(q_p)$ for $p = 1, \ldots N$ (see Fig. 5). If we write $G_1^0(q_p) = G_1^v(q_p) + \Delta G_1(q_p)$, the term of order $\Delta G_1(q_p)$ will be multiplied by $T_{2,v}(k - q_p)$, by all the diagrams of $T_{3,v}^1(k,k;k)$ on its left and by all the diagrams of $T_{3,v}^1(k,k;k)$ on its right. However, those diagrams are Feynman diagrams for $T_{3,v}^1(k,q;k)$ and $T_{3,v}^1(q,k;k)$, respectively. Therefore, when we resum all the diagrams with any number of T_2, we have

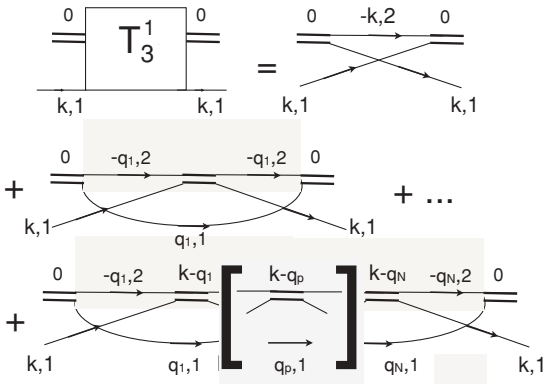


FIG. 5. The diagrammatic expansion of $T_3^1(k,k;k)$.

$$\sum_q T_{3,v}^1(k,q;k) T_{2,v}(k-q) \Delta G_1(q) T_{3,v}^1(q,k;k), \tag{A1}$$

where we have taken the atom-atom and atom-dimer T matrices in vacuum at lowest order. By looking at the diagrammatic expansion of $T_{3,v}^1(k,q;k)$ [$= T_{3,v}^1(q,k;k)$], we find that it is analytic for $\mathrm{Re}(i\omega_q) > 0$ ($q = \{\mathbf{q}, i\omega_q\}$ appears always with a minus sign in a particle 2 propagator G_2). For the same reason, $T_2(k-q)$ is analytic for $\mathrm{Re}(i\omega_q) > 0$. In the zero-temperature limit, we can therefore transform the frequency summation in Eq. (A1) in an integral along the imaginary axis. Then we deform this contour in the half-plane $\mathrm{Re}(i\omega_q) > 0$. We get the two contributions of the poles of $\Delta G_1(q)$ at the frequencies $(\mathbf{q}^2 - k_0^2)/2m_1$ and $\mathbf{q}^2/2m_1$ (on the shell) for $G_0^1(q)$ and $G_v^1(q)$, respectively,

$$\int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left\{ \left[T_{3,v}^1(k,q;k)\right]^2 T_{2,v}(k-q) \Theta(|\mathbf{q}| - k_0) - \left[T_{3,v}^1(k,q;k)\right]^2 T_{2,v}(k-q) \right\}, \tag{A2}$$

where $q = \{\mathbf{q}, (\mathbf{q}^2 - k_0^2)/2m_1\}$ and $q = \{\mathbf{q}, \mathbf{q}^2/2m_1\}$ for the first and second terms respectively. The main contribution to the integral comes from small wave vectors $|\mathbf{q}| \ll a^{-1}$, as is explained below. In this case, we can replace $T_{3,v}$ with its low-energy value $T_{3,v}(0,0;0) = Z^{-1} g_{\rm AD}$ (the Z factor comes from the two external dimer lines, each one giving a $\sqrt{Z}$ factor [15,20]). For such small wave vectors, we can also take

$T_{2,v}(\{\mathbf{K},i\Omega_K\}) \approx Z/(i\Omega_K - \mathbf{K}^2/2m_D)$ (a bosonic propagator multiplied by two $\sqrt{Z}$ factors for the incoming and outgoing dimer end). We therefore get at lowest order

$$T_3^1(k,k;k) - T_{3,v}^1(k,k;k) = Z^{-1}(g_{AD})^2 \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \times \left[\frac{\Theta(|\mathbf{q}| - k_0)}{\frac{(\mathbf{k}^2-\mathbf{q}^2)}{2m_1} - \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}{2m_D}} - \frac{1}{\frac{(\mathbf{k}^2-k_0^2-\mathbf{q}^2)}{2m_1} - \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}{2m_D}} \right]. \quad \text{(A3)}$$

We note that this correction is of order k_0 (since $|\mathbf{k}|$ is of order k_0), that is, of order (density)$^{1/3}$, due to the "small denominators" of order k_0^2.

We show now that the contribution to integral (A2) for wave vectors $|\mathbf{q}| > \Lambda$, where Λ is a cutoff, with $k_0 \ll \Lambda \ll a^{-1}$ is negligible. Indeed, in such a range of wave vectors, we can perform a Taylor expansion of the difference in Eq. (A2) with respect with the energy variable of q. The energy difference is of order k_0^2, and by close inspection of the high-wave-vector behavior of T_3^1 and T_2, we find a converging integral at infinity. The low-wave-vector behavior ($\sim\Lambda$) is dominated by the small denominators of the T_2's and this gives a contribution of order $k_0^2\Lambda$. Compare to the term of Eq. (A3); this is negligible if $k_0\Lambda a^2 \ll 1$. This is possible if $\Lambda = (k_0/a)^{1/2}$, for instance. As a conclusion, the high-wave-vector domain gives a negligible contribution.

We can make the same sort of analysis with ΔT_2. In this case, we would find that the characteristic low wave vector is of the order of the square root of the density [this is obtained by comparing μ_B and R to $\mathbf{K}^2$ in the denominator of Eq. (16)]. This gives a contribution of the order of (density)$^{1/2}$ instead of k_0, which is of the order of (density)$^{1/3}$. Therefore, it is negligible.

We can also consider the effect of ΔG_2. There is no small denominator in this case, since one has to compare the kinetic energy $\mathbf{q}^2/2m_2$ to the (large) chemical potential $\mu_2 \approx -|E_b|$. As a result, we find the correction is of the order of the chemical potential correction $\mu_2 + |E_b|$, which is of order k_0^2. Therefore, it is negligible here.

B. $T_{3,v}^1(k,k;k) - T_{3,v}^1(0,0;0)$

In order to calculate this difference, we note that in the diagrammatic expansion of $T_{3,v}^1(k,k;k)$, the four-wave vector k appears only in $G_2^v(k - q_p - q_{p+1})$ and in $T_2(k - k_p)$ (not in the G_1^v's). We define now $\Delta T_2(k - q_p) = T_2(k - q_p) - T_2(-q_p)$ and similarly for ΔG_2.

The corrections of order ΔG_2 gives a negligible term again, for the same reason as given Sec. A of this appendix.

The correction of order ΔT_2 can be analyzed like the correction of order ΔG_1 given previously. Indeed, we can permute the roles of $T_2(k - q_p)$ and $G_1(q_p)$ in the argument. In this way, we find

$$\sum_q T_{3,v}^1(0,q;0)\Delta T_{2,v}(k-q)G_1^v(q)T_{3,v}^1(q,0;0). \quad \text{(A4)}$$

The frequency summation is done as shown previously and we get the contribution on the shell

$$\int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\left[T_{3,v}^1\left(0,\left\{\mathbf{q},\frac{\mathbf{q}^2}{2m_1}\right\};0\right)\right]^2 \times \left[T_{2,v}\left(\left\{\mathbf{k}-\mathbf{q},\frac{\mathbf{k}^2-k_0^2-\mathbf{q}^2}{2m_1}\right\}\right) - T_{2,v}\left(\left\{-\mathbf{q},-\frac{\mathbf{q}^2}{2m_1}\right\}\right)\right]. \quad \text{(A5)}$$

We can show again that the low-wave-vector domain gives the main contribution and replace the atom-dimer T matrix with $Z^{-1}g_{AD}$ and the T_2's with their bosonic expressions. In this way we get at lowest order

$$T_{3,v}^1(k,k;k) - Z^{-1}g_{AD} = Z^{-1}(g_{AD})^2 \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\left[\frac{1}{\frac{(\mathbf{k}^2-k_0^2-\mathbf{q}^2)}{2m_1} - \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}{2m_D}} + \frac{1}{\frac{\mathbf{q}^2}{2m_{AD}}}\right]. \quad \text{(A6)}$$

Collecting Eqs. (A3) and (A6), we get

$$T_3^1(k,k;k) - Z^{-1}g_{AD} = Z^{-1}(g_{AD})^2(k_0)m_{AD}!F_{a,1}\left(\frac{|\mathbf{k}|}{k_0},\frac{m_D}{m_1}\right), \quad \text{(A7)}$$

where the dimensionless function $F_{a,1}$ is defined by

$$F_{a,1}(x,r) = 2\int \frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi)^3}\left[\frac{\Theta(|\mathbf{y}|-1)(r+1)}{r(\mathbf{x}^2-\mathbf{y}^2)-(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2} + \frac{1}{\mathbf{y}^2}\right]. \quad \text{(A8)}$$

APPENDIX B: EVALUATION OF $\frac{d}{dz}T_3^1(k,k;k)$

In order to evaluate this derivative, we note again that k appears in the diagrammatic expansion of $T_3^1(k,k;k)$ in the propagators of the particles 2 $G_2(k - q_p - q_{p+1})$ and in the dimer propagators $T_2(k - q_p)$. If we take the derivative of $T_2(k - q)$ with respect to the frequency of k, which we denote z here, we get, similarly to that in Appendix A, Sec. B,

$$\sum_q T_3^1(k,q;k)\frac{d}{dz}T_2(k-q)G_1^0(q)T_3^1(q,k;k). \quad \text{(B1)}$$

We can perform the frequency summation as before, which has the effect to take the frequency on the shell [$i\omega_q = (\mathbf{q}^2 - k_0^2)/2m_1$] and $|\mathbf{q}| > k_0$. Again, the low wave-vector domain gives the main contribution. We can safely replace the T_3^1's with $Z^{-1}g_{AD}$ and T_2 with the bosonic expression. We get at lowest order [using $k = \{\mathbf{k},(\mathbf{k}^2 - k_0^2)/2m_1\}$]

$$\frac{d}{dz}T_3^1(k,k;k) = -Z^{-1}(g_{AD}m_{AD})^2\frac{1}{k_0}F_{a,2}\left(\frac{|\mathbf{k}|}{k_0},\frac{m_D}{m_1}\right), \quad \text{(B2)}$$

where

$$F_{a,2}(x,r) = 4\int \frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi)^3}\frac{\Theta(|\mathbf{y}|-1)(r+1)^2}{[r(\mathbf{x}^2-\mathbf{y}^2)-(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2]^2}. \quad \text{(B3)}$$

APPENDIX C: CALCULATION OF $n_2^{(a)}$

We proceed like for the calculation of correction to T_3: For each propagator (G_1^0, G_2^0, or T_2), we write it as the sum of its value in vacuum plus a difference. In this way, we are left with most of the propagators in vacuum. Therefore, we start with all diagrams in vacuum for $S_2^{(a)}$. The calculation of the contribution to n_2 is then similar to what was done in Ref. [10], due to the analytical properties of $T_{3,v}^2(k,k;k)$ as a function of the frequency. We find $n_2 = \frac{|\Delta|^2}{Z}$. In the course of the calculation, we have used $2\mu \approx -|E_b|$ and we have neglected terms of the order of the density.

We turn now to corrections to propagators.

A. Correction of order ΔG_1

We first consider corrections of order ΔG_1. Looking at the diagrams for $S_2^{(a)}$, they look like Fig. 5, but with the roles of particles 1 and 2 exchanged. We see that G_1 appears in four places: (i) $G_1^0(-q_1)$, (ii) $G_1^0(-q_N)$, (iii) $G_1^0(k-q_p-q_{p+1})$, and (iv) $G_1^0(-k)$.

In case (i), we find the contribution to n_2

$$|\Delta|^2 \sum_{k,q_1} \left[G_2^v(k)\right]^2 \Delta G_1(-q_1) T_2(k-q_1) G_2^v(q_1) T_{3,v}^2(q_1,k;k).$$

However, in the diagrammatic expansion of $T_{3,v}^2(q_1,k;k)$, the variable k only appears with a plus sign. This means $T_{3,v}^2(q_1,k;k)$ is analytical for $\mathrm{Re}(i\omega_k) < 0$. This is also true for $T_2(k-q_1)$; therefore, when we sum on ω_k, we find zero. Case (ii) is similar if we replace q_1 with q_N, and we also find a result equal to zero.

Case (iii) is different. We find, similar to what was found in Appendix A, Sec. A , the following contribution to the density of particles 2:

$$\sum_{k,q,q'} \left[G_2^v(k)\right]^2 T_{3,v}^2(k,q;k) T_2(k-q) G_2^v(q) \Delta G_1(k-q-q') T_{3,v}^2(q',k;k) T_2(k-q') G_2^v(q'). \tag{C1}$$

All the integrand except $\Delta G_1(k-q-q')$ is analytical for $\mathrm{Re}(i\omega_k) < 0$. As usual, by deforming the contour of integration in the half plane $\mathrm{Re}(i\omega_k) < 0$, we get a pole of $G_1^0(k-q-q')$ for $i\omega_k = i\omega_q + i\omega_{q'} + [(\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}')^2 - k_0^2]/(2m_1)$ if $|\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}'| < k_0$. The difference $[(\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}')^2 - k_0^2]/(2m_1)$ is small compared to the binding energy $|E_b|$, which is the energy scale of $T_{3,v}^1$. Therefore, we can replace at lowest order $i\omega_k$ with $i\omega_q + i\omega_{q'}$ in Eq. (C1). In the same manner, since $|\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}'| < k_0$ is much smaller than a^{-1}, a typical wave-vector scale for $T_{3,v}^1$, we can replace $\mathbf{k}$ with $\mathbf{q}+\mathbf{q}'$ in Eq. (C1). This means that we can replace everywhere, at lowest order, the four-momentum k with $q+q'$ in Eq. (C1). The integrand is then independant of $\mathbf{k}$ and we get a phase space factor $k_0^3/(6\pi^2)$. The remaining summations on q and q' give the factor

$$\sum_{q,q'} \left[G_2^v(q+q')\right]^2 T_{3,v}^2(q+q',q;q+q') T_2(q') G_2^v(q) \times T_{3,v}^2(q',q+q';q+q') T_2(q) G_2^v(q'). \tag{C2}$$

We can perform the summation on the frequencies as before (only the "Born" contributions to $T_{3,v}^2$ contribute) and we get the two contributions on the shell $i\omega_q = -\mathbf{q}^2/(2m_1)$ and $i\omega_{q'} = -\mathbf{q}'^2/(2m_1)$:

$$\int \frac{d^3\mathbf{q} d^3\mathbf{q}'}{(2\pi)^6} T_2\left(\mathbf{q}, -\frac{\mathbf{q}^2}{2m_1}\right) G_2^v\left(\mathbf{q}, -\frac{\mathbf{q}^2}{2m_1}\right) T_2\left(\mathbf{q}', -\frac{\mathbf{q}'^2}{2m_1}\right) G_2^v\left(\mathbf{q}', -\frac{\mathbf{q}'^2}{2m_1}\right) \left[G_2^v\left(\mathbf{q}+\mathbf{q}', -\frac{\mathbf{q}^2+\mathbf{q}'^2}{2m_1}\right)\right]^2. \tag{C3}$$

This integral is convergent close to $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ and $\mathbf{q}'=\mathbf{0}$. It is also easily shown that it converges when the wave vectors tend to infinity. The integral (C3) is therefore a constant, independent of k_0. As a conclusion, this case (iii) gives a contribution to n_2 of order $|\Delta|^2(k_0)^3 = (\text{density})^2$ and we can safely neglect it.

Finally, we consider case (iv). This is given by

$$|\Delta|^2 \sum_k \left[G_2^v(k)\right]^2 \Delta G_1(-k). \tag{C4}$$

The frequency integration is easily done and we find

$$|\Delta|^2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{\Theta(k-k_0)}{\left(\frac{\mathbf{k}^2+a^{-2}}{2m_r} - \mu_1\right)^2} - \frac{1}{\left(\frac{\mathbf{k}^2+a^{-2}}{2m_r}\right)^2}\right] \approx \mu_1 |\Delta|^2 2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\left(\frac{\mathbf{k}^2+a^{-2}}{2m_r}\right)^3}. \tag{C5}$$

Performing the integral on $\mathbf{k}$, we find the contribution to n_2:

$$\mu_1 |\Delta|^2 \pi (m_r a)^3. \tag{C6}$$

B. Correction of order ΔG_2

Next, we study the contributions of order ΔG_2. In a diagram for $[G_2^0(k)]^2 S_2^{(a)}(k)$, a particle 2 propagator can be (i) in the two external propagators $G_2^0(k)$ or (ii) in the dimer-(fermion 2) T matrix $T_3^2(k,k;k)$. In case (i) the correction to n_2 of order ΔG_2 is given by

$$-2|\Delta|^2 \sum_k G_2^v(k) \Delta G_2(k) T_{3,v}^2(k,k;k). \tag{C7}$$

We can then write $T_{3,v}^2$ as the sum of $-G_1^v(-k)$, which has a pole for $-\mathbf{k}^2/(2m_1) < 0$, plus a function which is analytical for $\mathrm{Re}(i\omega_k) < 0$ [10]. The frequency summation is then done as usual by deforming the contour of inegration in the half plane $\mathrm{Re}(i\omega_k) < 0$. We get in this way, keeping terms of order $(\text{density})^{2/3}|\Delta|^2$,

$$-2(\mu_2 + |E_b|)|\Delta|^2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\left(\frac{\mathbf{k}^2+a^{-2}}{2m_r}\right)}. \tag{C8}$$

However, $\mu_2 + |E_b| = \mu_B - \mu_1 = -\mu_1 + O$ (density). At lowest order we can replace $-\mu_2$ with μ_1. This gives the contribution

$$-\mu_1 |\Delta|^2 \pi (m_r a)^3. \tag{C9}$$

Case (ii) is similar to what we discussed in Appendix A, Sec. A, except that the roles of particles 1 and 2 are exchanged.

Therefore, we find for the contribution to n_2

$$\sum_{k,q} \left[G_2^v(k)\right]^2 T_{3,v}^2(k,q;k) T_2(k-q) \Delta G_2(q) T_{3,v}^2(q,k;k). \tag{C10}$$

However, all the functions are analytical for $\mathrm{Re}(i\omega_k) < 0$. Therefore, we can perform the summation on ω_k by transforming it into an integral and deform the contour in the half-plane $\mathrm{Re}(i\omega_k) < 0$. In this way, we find that the sum of Eq. (C10) is zero.

C. Correction of order ΔT_2

We finish this appendix by adressing the contributions to n_2 of order ΔT_2. They are similar to the ones of order ΔG_2, since for every dimer propagator T_2 there is a fermion 2 propagator G_2. We find

$$\sum_{k,q} \left[G_2^v(k)\right]^2 T_{3,v}^2(k,q;k) \Delta T_2(k-q) G_2^v(q) T_{3,v}^2(q,k;k). \tag{C11}$$

Similar to Eq. (C10), we find that this contribution is zero.

D. Conclusion

As a conclusion of this appendix, we find that the two corrections Eqs. (C6) and (C9) of order $|\Delta|^2 k_0^2$ exactly compensate, and we find $n_2 = |\Delta|^2/Z$ and there is no correction up to order (density)$^{5/3}$ included.

APPENDIX D: FEYNMAN DIAGRAMS OF $S_1^{(b)}$

We explain here why the Feynman diagrams for the generalized self-energy $S_1(k)$ are given by Fig. 2(b) at the order we consider. We look for graphs with two anomalous self-energies (one Δ, one Δ^*) and one hole line. In general, this can be drawn as shown in Fig. 6(a). The white box is a new vertex with one incoming dimer (made of a fermion of species 1 and a fermion of species 2), two incoming fermions of species 1, and one outgoing dimer and two outgoing fermions of species 1. This sort of

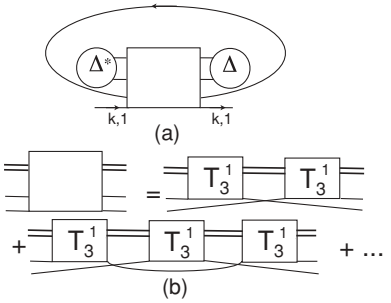


FIG. 6. (a) A general diagram for $S_1(k)$ with one hole line, one Δ, and one Δ^*. (b) Diagrammatic expansion of the new vertex. Only the first diagram contributes at lowest order (see text).

vertex is very similar to the vertex Φ introduced in [15], with one incoming dimer and two incoming fermions, which *do not* interact first (this condition is automatically fulfilled here since the two incoming fermions are of the same species). In this case, one of the incoming fermions 1 first interacts with the fermion 2 of the incoming dimer. All the subsequent processes are resummed in the dimer-fermion T matrix T_3^1 and we have one dimer and two fermions 1 at the output of T_3^1. Then the other fermion 1 interacts with the dimer, giving another T_3^1 [see Fig. 6(b)], etc. Consider the first term with two T_3^1's in Fig. 6(b). In order to get the generalized self-energy, we have to close a fermion 1 loop. It is then rather easy to see that in order to avoid double counting, we must consider the diagram of Fig. 2(b). As is shown in Eq. (44), this gives a contribution to the density of fermions 1 of order $|\Delta|^2 k_0^2$. This order of magnitude can be estimated easily: The condition $|\mathbf{k}| < k_0$ gives a factor k_0^3; the hole line in S_1 gives another factor k_0^3. However, there is a large term of order $1/k_0^4$ coming from the derivative of $T_2(p-k)$. This is so because *both p and k* are at low energy and therefore there is a small energy denominator of order $k_0^2/(2m_1)$. If we consider now the other terms with three or more T_3^1, we will get the same phase-space factor $(k_0)^6$, but as is easily seen by writing the diagrams, the dimer propagators will never be at low energy, and we will not get the large prefactor $1/(k_0)^4$. This concludes the justification for retaining diagrams of Fig. 2(b).

[1] Yong-il Shin, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **101**, 070404 (2008).

[2] D. E. Sheehy and L. Radzihovsky, Phys. Rev. Lett. **96**, 060401 (2006).

[3] S. Pilati and S. Giorgini, Phys. Rev. Lett. **100**, 030401 (2008).

[4] P. Pieri and G. C. Strinati, Phys. Rev. Lett. **96**, 150404 (2006).

[5] M. Iskin and C. A. R. Sà de Melo, Phys. Rev. A **77**, 013625 (2008).

[6] E. Taylor, A. Griffin, and Y. Ohashi, Phys. Rev. A **76**, 023614 (2007).

[7] A. P. Albus, S. A. Gardiner, F. Illuminati, and M. Wilkens, Phys. Rev. A **65**, 053607 (2002).

[8] L. Viverit and S. Giorgini, Phys. Rev. A **66**, 063604 (2002).

[9] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, Mineola, NY, 1975).

[10] X. Leyronas and R. Combescot, Phys. Rev. Lett. **99**, 170402 (2007); R. Combescot and X. Leyronas, Phys. Rev. A **78**, 053621 (2008).

[11] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).

[12] R. Combescot, X. Leyronas, and M. Yu. Kagan, Phys. Rev. A **73**, 023618 (2006).

[13] G. Partridge *et al.*, Science **311**, 503 (2006); M. Zwierlein *et al.*, *ibid.* **311**, 492 (2006); S. Nascimbène *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 170402 (2009).

[14] N. Prokof'ev and B. Svistunov, Phys. Rev. B **77**, 020408(R) (2008); R. Combescot, S. Giraud, and X. Leyronas, Europhys.

Lett. **88**, 60007 (2009); C. Mora and F. Chevy, Phys. Rev. A **80**, 033607 (2009); M. Punk, P. T. Dumitrescu, and W. Zwerger, *ibid.* **80**, 053605 (2009).

[15] I. V. Brodsky, M. Yu. Kagan, A. V. Klaptsov, R. Combescot, and X. Leyronas, JETP Lett. **82**, 273 (2005); Phys. Rev. A **73**, 032724 (2006).

[16] T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. **105**, 1119 (1957); T. D. Lee, K. Huang, and C. N. Yang, *ibid.* **106**, 1135 (1957).

[17] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, New York, 1980).

[18] D. S. Petrov, C. Salomon, and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. **93**, 090404 (2004).

[19] G. V. Skorniakov and K. A. Ter-Martirosian, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **31**, 775 (1956) [Sov. Phys. JETP **4**, 648 (1957)].

[20] J. Levinsen and V. Gurarie, Phys. Rev. A **73**, 053607 (2006).

Atom-dimer scattering length for fermions with different masses: Analytical study of limiting cases

F. Alzetto,[1] R. Combescot,[1,2] and X. Leyronas[1]

[1]*Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, UPMC Paris 06, Université Paris Diderot, CNRS, 24 rue Lhomond, F-75005 Paris, France*

[2]*Institut Universitaire de France, Paris, France*

(Received 23 July 2010; published 13 December 2010)

We consider the problem of obtaining the scattering length for a fermion colliding with a dimer, formed from a fermion identical to the incident one and another different fermion. This is done in the universal regime where the range of interactions is short enough that the scattering length a for nonidentical fermions is the only relevant quantity. This is the generalization to fermions with different masses of the problem solved long ago by Skorniakov and Ter-Martirosian for particles with equal masses. We solve this problem analytically in the two limiting cases where the mass of the solitary fermion is very large or very small compared to the mass of the two other identical fermions. This is done for both the value of the scattering length and the function entering the Skorniakov–Ter-Martirosian integral equation, for which simple explicit expressions are obtained.

DOI: 10.1103/PhysRevA.82.062706 PACS number(s): 03.65.Nk, 34.50.Cx, 05.30.Fk, 71.10.Ca

I. INTRODUCTION

Recent years have seen very important developments in the field of ultracold fermionic gases [1]. In addition to its own intrinsic interest, this field has a strong overlap with problems arising not only in condensed-matter physics, where the degenerate electron gas is an essential ingredient of metal physics, but also in nuclear physics and in quark matter physics [2]. A major strong point of these cold gas systems is the extreme simplicity of the effective interaction between fermions of different species, which can be fully described by the mere knowledge of the scattering length a, while there is no effective interaction between same-species fermions, since this has to occur in the s-wave channel because of the very low temperature and energies involved and this s-wave scattering is forbidden by the Pauli principle (we assume that no p-wave or higher-wave resonance occurs). In addition, the scattering length can be changed, in the vicinity of Feshbach resonances, by merely modifying the static uniform magnetic field applied to the trapped gas. This offers the fascinating possibility to control at will the strength of the interaction.

The first explorations of these gases have dealt with systems containing two different kinds of fermions with same particle number and same mass, in practice, fermionic atoms belonging to the same element but being in different hyperfine states. This is the most convenient and the most natural system to explore experimentally, and in addition the physical situation is the same as for electron in metals which may have their spins up or down and are roughly in equal number. A fair exploration has been made of the normal state and mostly of the superfluid state, where the whole BEC-BCS crossover has been studied to a large extent. More recently the research activity has moved toward systems where there is a sizable imbalance between the two fermionic populations [1] and where a great deal of interesting physics has been found. Quite recently some attention for fermions with different masses has arisen. This is because new interesting physics, both for normal and superfluid phases, is expected when the mass ratio becomes large [3–9]. Experimental developments in this direction are in progress in several laboratories around the world [10,11] and degeneracy has already been reached in these mixtures. Similarly, several quite recent theoretical works have focused on this situation [12,13], with an emphasis on systems with a small number of particles where multiparticle bound states are expected to occur.

As we have mentioned, the most interesting situations occur when there is a s-wave Feshbach resonance, which is directly linked to the appearance of a bound state, or molecular state, or dimer, between two atoms belonging to different fermion species. This will occur on the so-called Bose-Einstein condensate (BEC) side of the resonance, and on this side these dimers play clearly an essential role in the physics of the gas. As is quite common, we call the two involved fermion species spin-up and spin-down, by analogy with electrons in solids, even if we are actually interested in fermions belonging to different atomic elements. If the masses of these atoms are, respectively, $m_\uparrow$ and $m_\downarrow$, the mass of the dimer is the total mass $M = m_\uparrow + m_\downarrow$. The binding energy is $E_b = 1/(2\mu a^2)$, where $\mu = m_\uparrow m_\downarrow/(m_\uparrow + m_\downarrow)$ is the reduced mass. In addition to these dimers we have naturally in general on the BEC side isolated $m_\uparrow$ and $m_\downarrow$ fermionic atoms. This will occur, for example, at zero temperature if there is an imbalance between the two fermionic populations so that all fermions cannot be paired into dimers. This may also occur at nonzero temperature because the dimers will be thermally broken. Hence, scattering between dimer and isolated atoms will happen, and in cold gases this scattering will be fully characterized by the atom-dimer scattering length a_3. Clearly, this is, beyond the up-down scattering length a, one of the basic quantities coming in the physics of these systems. This is the quantity we are interested in. Quite specifically, we investigate the scattering length a_3 of a spin-up atom by a dimer.

Naturally, an important feature in these kind of systems is their stability [1]. It is known that inelastic three-body collisions are a major process for loss rate in these systems, being responsible for their limited experimental lifetime. Obviously, the existence of dimers favors these processes since two atoms are already fairly nearby in these bound states. This is indeed known to be a major problem in bosonic systems. Fortunately,

 ©2010 The American Physical Society

in fermionic systems, with which we are concerned here, these processes are comparatively restricted by the fact that, qualitatively, Pauli exclusion keeps the same-species fermions apart, limiting the overlap with deep bound states responsible for relaxation. This is the origin of the fairly long lifetime found for fermionic systems made of the same atomic element. However, the situation might be somewhat different for fermions with different masses and this is obviously a question under current experimental investigation. Moreover, in these systems dimer-dimer collisions provide also an important relaxation channel [1]. Finally [13], three-body and four-body resonances occurring in these systems might lead to efficient additional loss channels. In the present paper we assume that, nevertheless, the stability of the system is high enough for our investigation to be meaningful.

The calculation of a_3 is a long-standing problem and, for equal masses, the problem has been solved long ago by Skorniakov and Ter-Martirosian [14]. The generalization to different masses is naturally quite easy, either following the original paper [14] or making use of our recent work [15], as has been done recently by Iskin and Sá de Melo [16]. The resulting equation has been quite recently fully investigated numerically by Iskin [17]. Another approach has been used by Petrov [18], who has obtained a_3 by solving the three-body Schrödinger equation with the appropriate boundary conditions imposed by the scattering length a.

While the preceding works solve completely the problem as far as numbers are concerned, we feel that a deeper understanding of the involved equations is warranted for such a basic problem. Moreover, such a full control provides a first step to address more complicated problems which will arise in many-body problems, involving the same building blocks, which can be formulated with the same Green's-function formalism, using the same Feynman diagrams as we have done, for example, in [19]. Such a control means, in principle, a complete analytical investigation. Unfortunately, this does not seem possible in the general case. On the other hand, we have been able to carry out this investigation in the limiting cases where the mass ratio $r = m_\downarrow/m_\uparrow$ is either very large or very small and the purpose of this paper is to present our results. We note that for the small r limit Petrov [18] has done briefly a similar investigation based on a Born-Oppenheimer approximation within the Schrödinger equation. Here we address this problem within the Skorniakov and Ter-Martirosian approach, in a more systematic way and with more specific and precise results. After presenting the basic equation in Sec. II, we consider in Sec. III the case where the mass ratio r is very large and then in Sec. IV the case where it is very small. Since this last case is more involved, Sec. IV contains several subsections. Let us finally mention that an important ingredient in all the few-body problems is the existence of bound states of the whole system under study, in our case bound states of the spin-up atom and the dimer. This has been studied in great detail quite recently by Kartavtsev and Malykh [20] and these bound states include, in particular, the Efimov states [21], which have received recently a great deal of attention. However, since we are here only interested in fermions and in s-wave states, these bound states do not come in our problem since they appear only for nonzero angular momentum [20].

II. BASIC EQUATIONS

Our basic equation is obtained by writing directly [15] the integral equation for the full dimer-fermion scattering vertex $T_3(p_1,p_2;P)$, where P is the (conserved) momentum-energy of the particles $P \equiv \{\mathbf{P},E\}$, with $\mathbf{P}$ the total momentum and E the total frequency of incoming particles. p_1 is the momentum-energy of the incoming spin-up fermion and p_2 its outgoing value.

The scattering length is obtained by considering the case of total momentum $\mathbf{P}=\mathbf{0}$ and total energy $E=-E_b$. The incoming and outgoing momentum-energy of the scattering fermion should also be zero, $p_1=p_2=0$. Introducing the "on-the-shell" value of T_3 for the incoming fermion and the related function $a_3(\mathbf{p})$ according to

$$\left(\frac{2\pi}{\mu^2 a}\right) T_3\left(\{\mathbf{p},p^2/2m_\uparrow\},0;\{\mathbf{0},-E_b\}\right) \times\left[1+\sqrt{1+\frac{\mu}{\mu_T}(pa)^2}\,\right]=2\frac{2\pi}{\mu_T}a_3(\mathbf{p}), \tag{1}$$

the atom-dimer scattering length a_3 is merely given by $a_3=a_3(\mathbf{0})$. Here μ_T is the atom-dimer reduced mass $\mu_T = m_\uparrow M/(m_\uparrow+M) = m_\uparrow(m_\uparrow+m_\downarrow)/(2m_\uparrow+m_\downarrow)$. Then the integral equation for T_3, restricted to on-the-shell values, becomes the generalization for different masses of the equation of Skorniakov and Ter-Martirosian for $a_3(\mathbf{p})$, namely,

$$\frac{\mu}{\mu_T}\,\frac{\bar a_3(\bar{\mathbf{p}})}{1+\sqrt{1+\frac{\mu}{\mu_T}\bar p^2}} = \frac{1}{1+\bar p^2} - 4\pi\int\frac{d^3\bar{\mathbf{q}}}{(2\pi)^3}\,\frac{\bar a_3(\bar{\mathbf{q}})}{\bar q^2} \times\frac{1}{1+\bar p^2+\bar q^2+2\frac{\mu}{m_\downarrow}\bar{\mathbf{p}}\cdot\bar{\mathbf{q}}}, \tag{2}$$

where we have used reduced units by setting $a_3/a=\bar a_3$ and $\mathbf{p}=\bar{\mathbf{p}}/a$ and $\mathbf{q}=\bar{\mathbf{q}}/a$. The angular integration is easily performed, since $\bar a_3(\bar{\mathbf{p}})$ depends clearly only on $|\bar{\mathbf{p}}|$. Using the simpler notations $R=\mu/\mu_T$, $R'=2\mu/m_\downarrow$ (they are related by $R+R'^2/4=1$), together with $x=|\bar{\mathbf{p}}|=\bar p$, $y=|\bar{\mathbf{q}}|=\bar q$, and $f(x)=\bar a_3(\bar{\mathbf{p}})$, one finds

$$R\,\frac{f(x)}{1+\sqrt{1+Rx^2}} = \frac{1}{1+x^2} - \frac{1}{\pi R'}\int_0^\infty dy\,\frac{f(y)}{xy} \times\ln\frac{1+x^2+y^2+R'xy}{1+x^2+y^2-R'xy}. \tag{3}$$

For equal masses, $R=3/4$ and $R'=1$ and solving this equation gives the well-known result [14] for the atom-dimer scattering length $a_3=1.18a$.

The generalization of the Skorniakov and Ter-Martirosian equation following the preceding lines has been obtained by Iskin and Sá de Melo [16], who have solved the equation numerically and plotted a_3/a as a function of the mass ratio $r=m_\downarrow/m_\uparrow$. This has been taken up in great detail by Iskin [17]. Let us recall that the homogeneous equation corresponding to Eq. (3) has no solution, corresponding to the physical fact that [20,21] there are no Efimov states, nor any other bound state, for the three fermions problem we are considering.

Before turning to the limiting cases we are interested in, we present first some general results which will be useful in the following. Let us first consider the behavior of $f(x)$ when $x\to\infty$. If one assumes (which is confirmed numerically)

that, in the integral in the right-hand side of Eq. (3), $f(y)$ goes rapidly enough to zero for large y (possibly with an oscillating behavior) so that the integral converges, one can consider y as effectively bounded, and for $x \to \infty$ expand the logarithm. This leads from Eq. (3), in this large x range, to the simplified equation

$$\sqrt{R}\frac{f(x)}{x} = \frac{1}{x^2}\left[1 - \frac{2}{\pi}\int_0^\infty dy f(y)\right]. \tag{4}$$

Apparently, this leads to $f(x) \sim 1/x$, in contradiction with our starting hypothesis since, in this case, the integral on right-hand side of Eq. (4) diverges. The only possible escape is that the coefficient of $1/x^2$ on this right-hand side is zero. This leads to the simple relation

$$\int_0^\infty dy f(y) = \frac{\pi}{2}. \tag{5}$$

This relation is well satisfied numerically for all the mass ratio r that we have investigated.

Another simple relation is obtained by merely setting $x = 0$ in Eq. (3). This gives

$$\frac{R}{2}f(0) = 1 - \frac{2}{\pi}\int_0^\infty dy \frac{f(y)}{1+y^2}. \tag{6}$$

III. VERY HEAVY MASS

In the case where the spin-down particle has a very heavy mass, one has a situation quite close to the case where this mass is infinite $m_\downarrow = \infty$. In this last case, the physical situation is simpler than in the general case. Indeed, the spin-down particle acts merely as a fixed diffusion center for the two spin-up particles. Numerical calculations give $a_3 = a$ with excellent precision in this case.

Indeed, analytically, since we have then $R = 1$ and $R' \to 0$, Eq. (3) reduces in this case to

$$\frac{f(x)}{1+\sqrt{1+x^2}} = \frac{1}{1+x^2} - \frac{2}{\pi}\int_0^\infty dy f(y)\frac{1}{1+x^2+y^2}, \tag{7}$$

and we have found that it has the simple, but nontrivial, solution,

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, \tag{8}$$

since

$$\int_0^\infty dy \frac{1}{1+y^2}\frac{1}{1+x^2+y^2} = \frac{\pi}{2x^2}\left(1 - \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}\right) = \frac{\pi}{2}\frac{1}{1+\sqrt{1+x^2}}\frac{1}{\sqrt{1+x^2}}. \tag{9}$$

Hence, we find $a_3 = f(0) = 1$, which shows that the preceding conclusion from the numerical results is actually exact. We can check on this simple solution that Eq. (5) [and naturally also Eq. (6)] is indeed satisfied.

This simple but nontrivial result can be easily understood if we go back to the $\mathbf{r}$ space formulation and consider the wave function of the system. In the limit of a very heavy mass $m_\downarrow = \infty$, the spin-down particle does not move and it acts as a simple diffusion center, located at the origin for convenience, for the two spin-up particles. Since they do not interact, the eigenstates are properly antisymmetrized products of single spin-up particle wave functions. When one spin-up particle is far away from the origin, we want to describe a physical situation where one spin-up particle is in the bound state linked to the diffusion center, described by the (non-normalized) wave function $\exp(-r_1/a)/r_1$. The other spin-up is in a scattering state corresponding to an incident particle described by a plane wave $\exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_2)$ and a scattered particle in a diverging wave $\exp(ik_0 r_2)/r_2$. We are only interested in the s-wave component of this wave function, which is $\sin[k_0 r_2 + \delta_0(k_0)]/(k_0 r_2)$, with $\delta_0(k_0)$ the s-wave phase shift. This is the boundary condition for our scattering problem, but since the spin-up particles do not interact, this wave function is an exact eigenstate for any value of $\mathbf{r}_2$. The full antisymmetric wave function is then

$$\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{\exp(-r_1/a)}{r_1}\frac{\sin[k_0 r_2 + \delta_0(k_0)]}{k_0 r_2} - \frac{\exp(-r_2/a)}{r_2}\frac{\sin[k_0 r_1 + \delta_0(k_0)]}{k_0 r_1}. \tag{10}$$

It is already clear at this stage that the scattering amplitude is the same as the one of a single spin-up particle scattered by the diffusion center. The spin-up particle in the bound state does not play any role since the two particles do not interact.

If we consider the $k_0 \to 0$ limit, which is the one of interest for us for the scattering length, taking $\delta_0(k_0) \simeq -k_0 a$ into account, we have merely

$$\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{\exp(-r_1/a)}{r_1}\left(1 - \frac{a}{r_2}\right) - \frac{\exp(-r_2/a)}{r_2}\left(1 - \frac{a}{r_1}\right). \tag{11}$$

Following Skorniakov and Ter-Matirossian [14], we define a scattering wave function $\bar{\chi}(r) = \lim_{r_1 \to 0}[r_1 \Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r})]$. From Eq. (11), we find

$$\bar{\chi}(r) = 1 - \frac{a}{r} + \frac{a}{r}\exp(-r/a). \tag{12}$$

The large distance behavior of $\bar{\chi}(r)$ determines the atom-dimer scattering length a_3 according to

$$\bar{\chi}(r) \approx 1 - \frac{a_3}{r}, \tag{13}$$

valid for $r \gg a$. Looking at Eq. (12) in the limit $r \gg a$, we find, indeed, $a_3 = a$.

Let us define $\chi(\mathbf{p})$ as the Fourier transform of $\bar{\chi}(r)$. We know [14] that $a_3(\mathbf{p})$ and $\chi(\mathbf{p})$ are related to each other according to

$$\chi(\mathbf{p}) = (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}) - 4\pi\frac{a_3(\mathbf{p})}{\mathbf{p}^2}. \tag{14}$$

If we Fourier transform Eq. (12), we find $\chi(\mathbf{p}) = (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}) - 4\pi\frac{1}{a(a^{-2}+\mathbf{p}^2)\mathbf{p}^2}$. This corresponds to

$$a_3(\mathbf{p}) = \frac{1}{a(a^{-2}+\mathbf{p}^2)}, \tag{15}$$

which is precisely what we found (translated in nonreduced units) as a solution of our integral equation.

The normalization condition Eq. (5) can also easily be understood in this limit. Using Eq. (14), we easily find

$$\int_0^\infty dp a_3(p) = \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2}\int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\chi(\mathbf{p}) = \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2}\bar{\chi}(r=0). \tag{16}$$

From Eq. (12) we can directly check that $\bar{\chi}(r=0)=0$, and therefore $\int_0^\infty dp a_3(p) = \pi/2$. However, this result is obvious physically and therefore quite general. It states that, when the two spin-up particles are both at the origin ($\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{0}$), the wave function $\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ is zero due to the Pauli exclusion principle. Hence, it is quite likely that the same explanation for Eq. (5) holds in the general case where $m_\downarrow$ is not infinite, and we show explicitly in the Appendix that this is indeed the case.

IV. VERY LIGHT MASS

This situation turns out to be much more complicated than the preceding one, and it is the essential focus of our paper.

A. Case $m_\downarrow = 0$

Let us first investigate the limit $m_\downarrow \to 0$. We find a fairly singular result, but this will allow us to understand how to handle the case of a very light mass. For $m_\downarrow \to 0$, we have $R \to 0$ and $R' \to 2$, so that Eq. (3) becomes

$$\int_0^\infty dy \frac{f(y)}{y} \ln\frac{1+(x+y)^2}{1+(x-y)^2} = 2\pi\frac{x}{1+x^2}. \tag{17}$$

Quite generally, from Eq. (3), $f(x)$ is an even function of x. This allows us to rewrite Eq. (17) as

$$-\int_{-\infty}^\infty dy \frac{f(y)}{y} \ln\left[1+(x-y)^2\right] = 2\pi\frac{x}{1+x^2}. \tag{18}$$

This convolution product can more easily be handled by integrating by parts. Introducing

$$\mathcal{F}(y) = \int_{-\infty}^y dy \frac{f(y)}{y}, \tag{19}$$

which satisfies $\mathcal{F}(+\infty)=0$ by parity, and is even with respect to y, by-parts integration gives

$$\int_{-\infty}^\infty dy \mathcal{F}(x-y)\frac{y}{1+y^2} = -\pi\frac{x}{1+x^2}. \tag{20}$$

This is easily solved by Fourier transform. The Fourier transform of $x/(1+x^2)$ is

$$t(k) \equiv -i\pi\,\mathrm{sgn}(k)\exp(-|k|), \tag{21}$$

but since it appears on both sides of the equation, the result for the Fourier transform $\bar{\mathcal{F}}(k)$ (which is real and even),

$$\bar{\mathcal{F}}(k) = \int_{-\infty}^\infty dy \mathcal{F}(y)\exp(-iky), \tag{22}$$

is immediately seen to be

$$\bar{\mathcal{F}}(k) = -\pi. \tag{23}$$

Going back to our original function this translates into

$$f(x) = -\pi x\delta'(x), \tag{24}$$

where the derivative δ' of the Dirac δ function is defined, as usual, by $\int_{-\infty}^\infty dx\delta'(x)F(x) = -F'(0)$. Indeed, inserting the preceding result for $f(x)$ into Eq. (18), it is immediately seen that it is solution. We can check that relation (5) is satisfied since

$$\int_0^\infty dy f(y) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^\infty dy f(y) = -\frac{\pi}{2}\int_{-\infty}^\infty x\delta'(x) = \frac{\pi}{2}. \tag{25}$$

Actually, this solution is not unique since, from Eq. (17), one may add any function extremely localized around the origin (i.e., a δ-like function), and having a zero total weight. An example of such a function is $\delta(x) + x\delta'(x)$. As a result, $\pi\delta(x)$ is also a solution, as it is easily directly checked in Eq. (17). This singular degeneracy disappears when we consider in the next subsection a very small, but non zero, $m_\downarrow$ and we look for a regular solution. It makes it also pointless to discuss the value of the scattering length, although the fact that $\pi\delta(x)$ is a solution makes reasonable the fact that it is infinite in the present limit.

If we take Eq. (6), we see that the right-hand side is zero. This looks to be coherent with the fact that $R=0$ in the case we consider. However, since we suspect that $f(0)$ goes to infinity, this shows more precisely that the scattering length does not diverge as fast as $1/R \sim m_\uparrow/(2m_\downarrow)$. This is confirmed in the next subsection.

Finally, we note that the solution [Eq. (24)] we have found is completely concentrated at $x=0$. Accordingly, we expect that, for the case of very small $m_\downarrow$ which we investigate in the next subsection, the solution will be strongly concentrated around $x=0$ and decay very rapidly for large x. We remark as a consequence that the condition we required for Eq. (5) to be valid is satisfied.

B. Very small $m_\downarrow$

Just as in the preceding case, we use a Fourier transform, so it is useful to translate the various quantities and relations we are interested in. First of all, we have for the scattering length

$$\bar{a}_3 \equiv \frac{a_3}{a} = f(0) = \lim_{y\to 0} f(y), \tag{26}$$

with

$$f(y) = y\frac{d}{dy}\mathcal{F}(y) = \int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{2\pi}k\bar{\mathcal{F}}(k)\frac{d}{dk}\exp(iky) = -\int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{2\pi}\frac{d}{dk}[k\bar{\mathcal{F}}(k)]\exp(iky) \tag{27}$$

[to avoid divergences, k integrals must be regularized by putting a factor $\exp(-\eta|k|)$ and then letting $\eta \to 0_+$] so that

$$\bar{a}_3 = -\frac{1}{\pi}\lim_{k\to+\infty} k\bar{\mathcal{F}}(k), \tag{28}$$

since $\bar{\mathcal{F}}(k)$ is an even function of k. In the case of the preceding subsection with $m_\downarrow = 0$, this gives indeed $\bar{a}_3 = \infty$ because we had $\bar{\mathcal{F}}(k) = -\pi$.

Similarly, the relation Eq. (5) becomes

$$\frac{\pi}{2} = \int_0^\infty dy f(y) = \int_0^\infty dy y\frac{d}{dy}\mathcal{F}(y) = -\int_0^\infty dy\mathcal{F}(y), \tag{29}$$

which gives

$$\bar{\mathcal{F}}(0) = -\pi. \tag{30}$$

Let us now expand Eq. (3) to lowest order in $r = m_\downarrow/m_\uparrow$, with $R \simeq 2r$ and $R' \simeq 2(1-r)$. The left-hand side becomes $Rf(x)/2$. One may wonder if neglecting entirely the term Rx^2 is a proper approximation, since even when R is small, it may become very large if x goes to infinity. However, we have stressed that, for small $m_\downarrow$, $f(x)$ is very strongly peaked around $x = 0$ and becomes very small for large x. Hence, what happens for large x is irrelevant and our approximation is legitimate. On the right-hand side we expand the logarithm to first order in $R' - 2 = -2r$. Just as in Sec. IV A we take advantage of the even parity of $f(x)$ to extend the integral from $-\infty$ to ∞. After multiplication by $\pi R' x$, we obtain

$$2\pi r x f(x) = 2\pi(1-r)\frac{x}{1+x^2} + \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{f(y)}{y} \ln[1+(x-y)^2] + 2rx \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \frac{1}{1+(x-y)^2}. \tag{31}$$

Again in the last term the convolution product will give a simple product in Fourier transform. The Fourier transform of $1/(1+x^2)$ is merely $i\,\mathrm{sgn}(k)t(k)$. Taking into account that the Fourier transform of $f(x)$ is $-d[k\bar{\mathcal{F}}(k)]/dk$ from Eq. (27), we obtain

$$t(k)\bar{\mathcal{F}}(k) + \pi(1-r)t(k) + i\pi r \frac{d^2}{dk^2}[k\bar{\mathcal{F}}(k)] + r\frac{d}{dk}\left[t(k)\frac{d}{dk}[k\bar{\mathcal{F}}(k)]\right] = 0, \tag{32}$$

where we have restricted ourselves to the case $k > 0$, which is enough since $\bar{\mathcal{F}}(k)$ is even in k. We see immediately that, if we assumed $\bar{\mathcal{F}}(k)$ to be a constant, the result would still be $\bar{\mathcal{F}}(k) = -\pi$, unchanged with respect to the case $m_\downarrow = 0$. Introducing accordingly $G(k) = \bar{\mathcal{F}}(k) + \pi$, performing the derivations and making use of the explicit expression of $t(k)$, we find the homogeneous differential equation:

$$r\{\,k(1-e^k)G'' + [2(1-e^k) - k]G'\} + G = 0. \tag{33}$$

We see that condition Eq. (30), which becomes $G(0) = 0$, is automatically satisfied by Eq. (33). More precisely, in the vicinity of $k = 0$, the two independent solutions of Eq. (33) behave as k^α, with $\alpha = -1 \pm \sqrt{1+1/r}$. Only the solution with $\alpha = -1 + \sqrt{1+1/r}$ satisfies Eq. (30), which provides us with a boundary condition.

Since r is small, this equation is similar to a Schrödinger equation for which the WKB approximation could be applied. It is convenient to make a change of function to bring it precisely under the form of a Schrödinger equation. This is done by setting

$$G(k) = \frac{1}{k\sqrt{1-e^{-k}}} g(k), \tag{34}$$

which leads to

$$k(1-e^k)g'' + \left[1 - \frac{k}{2} - \frac{1}{4}\frac{k}{e^k-1} + \frac{1}{r}\right] g = 0. \tag{35}$$

Just as $G(k)$, $g(k)$ must satisfy

$$g(0) = 0. \tag{36}$$

On the other hand, because of the term e^k in the coefficient of g'', as soon as k is of order of a few units, this coefficient will be large compared to the coefficient of g. More specifically, when $k \gtrsim \ln(1/r)$, Eq. (35) will reduce to $g'' = 0$. (We might worry that, in the coefficient of g, $-k/2$ will dominate $1/r$ for large k; however, when this occurs we will be anyway fully in the regime where $g'' = 0$ is valid, so this does not change our conclusion.) In this regime the general solution is naturally $g(k) = Ak + B$. However, from Eq. (28) we know that, for large k, $\bar{\mathcal{F}}(k) \simeq -\pi a_3/k$. This implies $G(k) \simeq \pi - \pi a_3/k$ and from Eq. (34) $g(k) \simeq \pi k - \pi a_3$. Hence, we know that, for large k, $g(k)$ has an asymptote with slope $A = \pi$. This fixes the coefficient of the solution of the homogeneous Eq. (35) satisfying $g(0) = 0$. Hence, we have a unique solution as it should be, and the constant $B = -\pi a_3$ will give us the scattering length. Equivalently, we can say that, if we take a solution satisfying $g(0) = 0$, its asymptotic behavior for large k is $g(k) \simeq Ak + B$ and we have $a_3 = -B/A$.

Now, with the preceding discussion, we can further simplify Eq. (35) taking into account that we are only interested in this equation when r is small. In this case, when k is not very large, the coefficient of g is essentially equal to $1/r$. On the other hand, when k is large enough that this is no longer valid, the equation reduces to $g'' = 0$. Hence, in all cases Eq. (35) may be simplified into

$$\epsilon^2 g''(k) = \frac{1}{k(e^k-1)} g(k) \equiv Q(k)g(k), \quad Q(k) = \frac{1}{k(e^k-1)}, \tag{37}$$

where we have set $r = \epsilon^2$.

C. WKB solution

Since we are in a situation where ϵ^2 is very small, we can solve Eq. (37) using the WKB method. The solution which satisfies $g(0) = 0$ is, within a multiplicative constant,

$$g(k) = \frac{1}{[Q(k)]^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{\epsilon}\int_k^\infty dx \sqrt{Q(x)}\right], \tag{38}$$

where the arbitrary choice of the upper bound of the integral modifies only the arbitrary multiplicative constant. We note that, for $k \to 0$, $Q(k) \simeq 1/k^2$, and the solution [Eq. (38)] behaves as $g(k) \sim k^{\frac{1}{2}+\frac{1}{\epsilon}}$. This is naturally in agreement with what can be obtained directly from Eq. (37), and this corresponds to what has been found for Eq. (33) for small ϵ, taking the change [Eq. (34)] into account.

Unfortunately, we cannot extract from Eq. (38) the asymptotic behavior of $g(k)$ for large k because in this limit $Q(k) \to 0$ and we have to deal with a turning point for our Eq. (37), which is located at $k = \infty$. Nevertheless, for large k we have $Q(k) \simeq e^{-k}/k$ and Eq. (37) becomes

$$\epsilon^2 g'' = \frac{e^{-k}}{k} g, \tag{39}$$

and its solution [Eq. (38)] simplifies somewhat into

$$g(k) = k^{1/4} e^{k/4} \exp\left[-\frac{1}{\epsilon}\int_k^\infty dx \frac{e^{-x/2}}{\sqrt{x}}\right]. \tag{40}$$

As for the standard treatment of the Schrödinger equation within the WKB approximation, we have to solve directly Eq. (39) near the turning point and match the solution to Eq. (40). Since the turning point is at infinity it is more convenient to bring it to zero by the additional change of variable,

$$z = 2e^{-\frac{k}{2}}, \tag{41}$$

which transforms Eq. (39) into an equation for $\bar{g}(z) = g(k)$, namely,

$$z\frac{d^2\bar{g}(z)}{dz^2} + \frac{d\bar{g}(z)}{dz} - \frac{z}{L(z)}\bar{g}(z) = 0, \tag{42}$$

with $L(z) = 2\epsilon^2 \ln(2/z)$ and the solution [Eq. (40)] reads now within an arbitrary multiplicative constant:

$$\bar{g}(z) = \frac{[L(z)]^{1/4}}{\sqrt{z}} \exp\left[-\int_0^z dx \frac{1}{[L(x)]^{1/2}}\right]. \tag{43}$$

In contrast with the standard treatment of the turning point in the Schrödinger equation, where the solutions are the Airy functions with known mathematical properties, we do not know the solutions of Eq. (42) and we would have to find their mathematical properties. However, we may notice (and this could be a first step in a mathematical study) that, for small z, $L(z)$ is a quite a slowly varying function of z, compared to z or z^2. In a first step, we may treat it as a constant $L(z) \simeq L$. Then the further change of variable $z = \sqrt{L}x$ brings Eq. (42) into

$$x\frac{d^2\tilde{g}(x)}{dx^2} + \frac{d\tilde{g}(x)}{dx} - x\tilde{g}(x) = 0, \tag{44}$$

for $\tilde{g}(x) = \bar{g}(z)$. The solutions of this equation are [22] the well-known Bessel functions $I_0(x)$ and $K_0(x)$. The form of the solution [Eq. (43)] for large z, which becomes now within an arbitrary multiplicative constant,

$$\tilde{g}(x) = \frac{1}{\sqrt{x}} e^{-x}, \tag{45}$$

serves as a boundary condition to find the proper solution of Eq. (44). Since for large x, we have $I_0(x) \simeq e^x/\sqrt{2\pi x}$ while $K_0(x) \simeq \sqrt{\pi/2x}e^{-x}$, we see from Eq. (45) that the solution we are looking for is just $\tilde{g}(x) = K_0(x)$. On the other hand, it is known [22] that, for small x, $K_0(x) \simeq -\ln x + \ln 2 - C$, where $C = 0.577\,215...$ is the Euler constant. Going back to the variable k through $x = 2e^{-k/2}/\epsilon\sqrt{k}$, we obtain

$$g(k) \simeq \frac{k}{2} + \ln\epsilon - C + \frac{1}{2}\ln k. \tag{46}$$

The last term, proportional to $\ln k$, is not consistent with Eq. (39) and its presence is due to our preceding approximation of treating the logarithm $L(z)$ as essentially constant. However, if we stay coherent with this approximation and notice that the domain we consider for the behavior of $K_0(x)$ is $x \sim 1$, we have to dominant order in this domain $k \simeq \ln(1/\epsilon^2)$ and we have to replace coherently $\ln k$ with $\ln[\ln(1/\epsilon^2)]$. As we have seen, $\bar{a}_3$ is obtained from the ratio of the constant to the coefficient of k in Eq. (46). From $\epsilon = \sqrt{m_\downarrow/m_\uparrow}$, this leads to

$$\bar{a}_3 \simeq \ln(m_\uparrow/m_\downarrow) - \ln[\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)] + 2C. \tag{47}$$

Hence, to dominant order we find $\bar{a}_3 \simeq \ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$, which is in agreement with the estimate by Petrov [18] in the large $m_\uparrow/m_\downarrow$ regime. However, our handling of the $\ln k$ term as a quasiconstant may look somewhat uncertain and one may be more uncertain about the last two terms of our result [Eq. (47)]. Therefore, we present in the next section an alternative derivation of the scattering length from Eq. (37) which will give us more confidence in our result [Eq. (47)] and will even allow us to go beyond this result.

D. Alternative derivation of the scattering length

In the preceding section we obtained our result by matching the WKB solution at infinity, which requires a somewhat uneasy handling. Here, in order to obtain the scattering length, we use another method which avoids this problem, or rather puts it on a much more secure basis. It makes use of the fact that $Q(k)$ goes very rapidly to zero when k goes to infinity. Hence, we can integrate Eq. (37), making use of the boundary conditions $g(0) = 0$ and $g'(0) = 0$, which results directly from the $g(k) \sim k^{\frac{1}{2}+\frac{1}{\epsilon}}$ behavior we found in the preceding section. A first integration gives

$$\epsilon^2 g'(k) = \int_0^k dx\, Q(x)g(x). \tag{48}$$

Another integration, followed by a by-parts integration leads to

$$\epsilon^2 g(k) = k\int_0^k dx\, Q(x)g(x) - \int_0^k dx\, x\, Q(x)g(x). \tag{49}$$

Since $Q(k)$ goes very rapidly to zero when k goes to infinity, whereas we know that $g(k) = Ak + B$ for large k, we may replace the upper bounds of the integrals with $+\infty$ as soon as k is large. This gives in this large k regime

$$\epsilon^2 g(k) = k\int_0^\infty dx\, Q(x)g(x) - \int_0^\infty dx\, x\, Q(x)g(x) \equiv \bar{A}k - \bar{B}, \tag{50}$$

which displays precisely the expected asymptotic behavior. The scattering length is then obtained from $a_3 = \bar{B}/\bar{A}$. At first this seems useless since the integrals imply the knowledge $g(k)$. However, since $Q(k)$ goes very rapidly to zero, we can use one of the approximate solutions which have been discussed earlier and which would be valid for the whole range of integration. A first idea is to use the WKB solution [Eq. (38)], which leads, within an unimportant multiplicative constant, to

$$\bar{A} = \int_0^\infty dk\,[Q(k)]^{3/4} \exp\left[-\frac{1}{\epsilon}\int_k^\infty dx\sqrt{Q(x)}\right], \tag{51}$$

$$\bar{B} = \int_0^\infty dk\, k\,[Q(k)]^{3/4} \exp\left[-\frac{1}{\epsilon}\int_k^\infty dx\sqrt{Q(x)}\right]. \tag{52}$$

Since the WKB solution increases rapidly with k while $Q(k)$ decreases rapidly, a further idea is to use a saddle-point

estimate. For $\bar{B}$, for example, the saddle point k_0 corresponds to a maximum of the integrant of Eq. (52), or rather its logarithm. This gives for k_0 the equation

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{3}{4\sqrt{k_0}} e^{\frac{k_0}{2}}, \tag{53}$$

where we have already used the fact that k_0 is large. To dominant order this gives $k_0 \simeq 2\ln(1/\epsilon) = \ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$. To dominant order the saddle point for $\bar{A}$ is located at the same place, because $\bar{A}$ and $\bar{B}$ differ only by the factor k in the integrants. For the same reason we obtain to dominant order $a_3 = \bar{B}/\bar{A} \simeq k_0 \simeq \ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$, which makes it possible already to recover the dominant order of our result [Eq. (47)]. Unfortunately, this result for k_0 shows that the saddle point is located at a k value where the argument of the exponential in the WKB solution [Eq. (38)] is of order one. This implies that the WKB solution is no longer reliable because this k_0 is too large and we are already not far enough from the turning point located at infinity.

Fortunately, we have found an approximate solution of Eq. (37) which matches the WKB solution to the solution at infinity, namely, $K_0(x)$ with $x = 2e^{-k/2}/\epsilon\sqrt{k}$. This solution is only approximate because we have treated k as a quasiconstant, compared to e^{-k}. However, the fact that the integrants for $\bar{A}$ and $\bar{B}$ are sharply peaked, allowing as we have seen the use of a saddle point evaluation, makes this treatment of k as a quasiconstant a very good approximation for our purpose. In particular, the sharp decrease of $Q(k)$ allows us not to have to worry about very large values of k.

Performing the change of variable $x = 2e^{-k/2}/\epsilon\sqrt{k}$ in $\bar{A}$ and $\bar{B}$, as given in Eq. (50), with k quasiconstant, we find

$$\bar{A} = \frac{\epsilon^2}{2} \int_0^\infty dx x K_0(x), \tag{54}$$

$$\bar{B} = \frac{\epsilon^2}{2} \int_0^\infty dx x k(x) K_0(x), \tag{55}$$

where $k(x)$ is the inverse function of $x = 2e^{-k/2}/\epsilon\sqrt{k}$. It satisfies

$$k(x) = \ln\frac{1}{\epsilon^2} - 2\ln x + 2\ln 2 - \ln k(x). \tag{56}$$

Actually, we do not need a saddlepoint calculation since we have the exact results [22]:

$$\int_0^\infty dx\ x K_0(x) = 1, \tag{57}$$

$$\int_0^\infty dx\ x \ln x K_0(x) = \ln 2 - C. \tag{58}$$

Since in the integral we have $x \sim 1$ because $K_0(x)$ decreases exponentially for large x, we have to dominant order $k(x) \simeq \ln(1/\epsilon^2)$ and we may replace $k(x)$ with this approximate value in the last term in the right-hand side of Eq. (56). This leads us exactly again to Eq. (47) for the expression of $\bar{a}_3$.

We may even try to improve on this result by refining our handling of the last term in Eq. (56). We could just iterate our procedure. However, this would produce new integrals to evaluate and there is no justification to go to such a refinement. On the other hand, since we have seen that $x \sim 1$ for the dominant range of integration, we may just set $\ln x \simeq 0$. This leads to replacing, in the last term in the right-hand side of Eq. (56), $k(x)$ with $\bar{k}_0$. This gives for $\bar{k}_0$ the equation

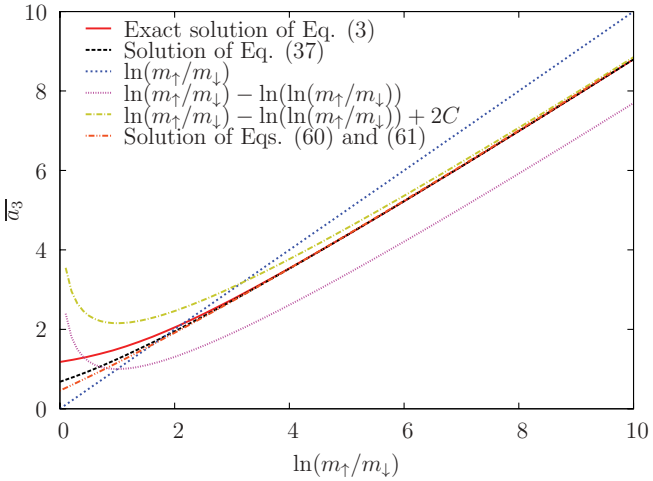


FIG. 1. (Color online) Reduced fermion-dimer scattering length $\bar{a}_3 = a_3/a$ as a function of the mass ratio $m_\uparrow/m_\downarrow$. Solid line, exact solution from Eq. (3); dashed line, exact solution of Eq. (37) corresponding to the first-order approximation of Eq. (3) for small $m_\downarrow/m_\uparrow$; dotted line, dominant result $\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$; small dotted line, inclusion of the subdominant contribution $-\ln[\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)]$; dashed-dotted line, full asymptotic result Eq. (47); dash-double-dotted line, parametric representation of Eqs. (60) and (61).

$$\ln(m_\uparrow/m_\downarrow) = \bar{k}_0 + \ln\bar{k}_0 - 2\ln 2, \tag{59}$$

while $\bar{a}_3$ is still obtained from Eq. (56) by replacing $k(x)$ with $\bar{k}_0$ in the last term in the right-hand side, which yields

$$\bar{a}_3 = \ln(m_\uparrow/m_\downarrow) - \ln\bar{k}_0 + 2C. \tag{60}$$

This gives us a parametric representation of $\bar{a}_3$ in terms of $\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$, with $\bar{k}_0$ as parameter. This is easily plotted. The result has the pleasant feature of eliminating the divergent behavior of Eq. (47) for small $\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$ [which is nevertheless not at all disturbing since we are exploring actually the large $\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$ domain]. However, the result is slightly less satisfactory for large $\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$. This can be improved by noticing that replacing $\ln x$ with 0 is just a first reasonable try, but that the actual result is rather obtained by replacing it with a constant of order 1. Hence, if we replace Eq. (59) with

$$\ln(m_\uparrow/m_\downarrow) = \bar{k}_0 + \ln\bar{k}_0 - F \tag{61}$$

and treat F as a fitting parameter, we may hope to obtain a better result. Indeed, we obtain an excellent result over the whole range of variation of $\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$ for $F = 2.7$, as can be seen in Fig. 1.

E. Comparison with numerical results

As we mentioned at the beginning, it is naturally easy to find at any stage the numerical answers to the questions we raise. For example, we display in Fig. 1 the numerical solution of the exact problem Eq. (3), giving $\bar{a}_3$ as a function of $\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$. We can also solve numerically for $\bar{a}_3$ the equation [Eq. (37)] we have obtained for large $m_\uparrow/m_\downarrow$. The result is also displayed in

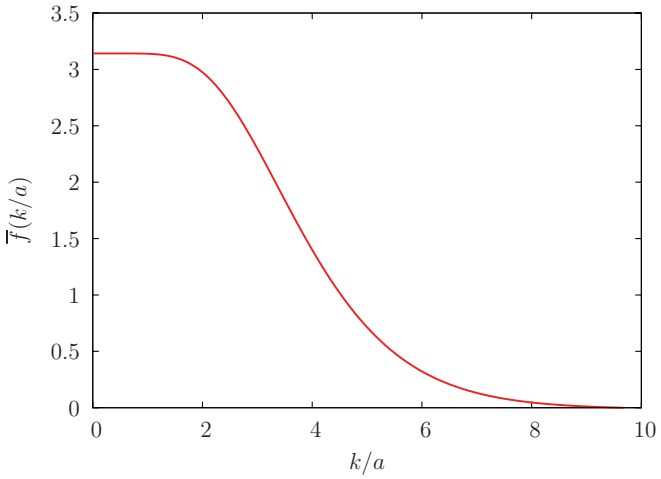


FIG. 2. (Color online) Solution of Eq. (62) for $m_\uparrow/m_\downarrow = 10^2$. To be explicit we use non reduced units for k, which has the dimension of a length and is expressed naturally in terms of the scattering length a. Note the very flat part for small k/a.

Fig. 1. As could have been expected, the difference between the exact solution and this approximate solution of large $m_\uparrow/m_\downarrow$ becomes quite small for $\ln(m_\uparrow/m_\downarrow) \sim 2$, that is, $m_\uparrow/m_\downarrow \sim 7$. We have then shown the lowest-order approximation $\bar{a}_3 = \ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$, which is a straight line on this graph and which is clearly not so satisfactory. Next we have plotted the first two terms of Eq. (47). It is clear that the $-\ln[\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)]$ corrective term leads to the proper shape for large $m_\uparrow/m_\downarrow$. Finally, plotting the whole Eq. (47) shows that the constant $2C$ leads to a perfect agreement with the exact result for large $m_\uparrow/m_\downarrow$. However, for low $m_\uparrow/m_\downarrow$ this result departs strongly from both the exact one and the exact solution of Eq. (37), due to the divergence of the $-\ln[\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)]$ term. This deficiency is eliminated by the parametric solution Eqs. (60) and (61), which gives an agreement with the solution of Eq. (37) which is almost perfect over the whole range $m_\uparrow/m_\downarrow > 1$.

F. The function $\bar{a}_3(\bar{\mathbf{p}})$

Finally, it is of interest to consider the approximate solution $\bar{a}_3(\bar{\mathbf{p}})$, or $f(x)$ with our simpler notations, we find for the basic integral equation [Eq. (2)]. From Eq. (27) its Fourier transform $\bar{f}(k)$ is

$$\bar{f}(k) = -\frac{d}{dk}\left[k\bar{\mathcal{F}}(k)\right] = \frac{d}{dk}\left(\pi k - \frac{g(k)}{\sqrt{1-e^{-k}}}\right), \qquad (62)$$

which is easily calculated numerically. An example is given in Fig. 2. It is peaked around $k = 0$ and has a width of order $k_0 \simeq \ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$, as can be seen from the WKB expression [Eq. (38)] for $g(k)$. Hence, $f(x)$ is peaked around $x = 0$ with a typical width $1/\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)$ and is accordingly very narrow, as expected. One checks that Eq. (62) gives $f(0) = \bar{a}_3$ from the asymptotic behavior of $g(k)$. The large x's behavior is obtained from the small k dependence of $\bar{f}(k)$, which is $\bar{f}(k) \simeq \pi - d(k^{-1/2}g(k))/dk$ with $g(k) \sim k^{\frac{1}{2}+\frac{1}{\epsilon}}$, as we have seen. This leads to an extremely fast decrease $f(x) \sim 1/x^{1+1/\epsilon}$ at large x.

However, we are essentially interested in the domain where $f(x)$ is clearly different from zero, which is obtained for fairly small values of x since $f(x)$ is narrow. These will come from $\bar{f}(k)$ with fairly large values of k. In this range we can set in Eq. (62) $1 - e^{-k} \simeq 1$ and take the approximate solution $g(k) = 2\pi K_0[2e^{-k/2}/(\epsilon\sqrt{k})]$, where the prefactor provides the correct asymptotic behavior for $g(k)$. On the other hand, if $x \neq 0$ the first term on the right-hand side of Eq. (62) gives no contribution. Taking into account the even parity of $\bar{f}(k)$, integrating by parts and taking the complex conjugate, we obtain

$$f(x) = 2x\mathrm{Im}\int_0^\infty dk e^{-ikx} K_0\left(\frac{2e^{-k/2}}{\epsilon\sqrt{k}}\right). \qquad (63)$$

For small k the Bessel function K_0 goes very rapidly to zero, while for very large k the Bessel function varies slowly while the oscillating factor e^{ikx} leads to destructive interferences. Hence, the dominant contribution arises when the argument of the Bessel function is of order unity, that is, again, when k is of order $k_0 \simeq \ln(m_\uparrow/m_\downarrow) = 2\ln(1/\epsilon)$. Hence, we can again treat in the argument of the Bessel function k as a quasiconstant and write $\sqrt{k} \simeq \sqrt{2\ln(1/\epsilon)}$. Taking $t = 2e^{-k/2}/[\epsilon\sqrt{2\ln(1/\epsilon)}]$ as new variable and making use of [22] $\int_0^\infty dt t^\mu K_0(t) = 2^{\mu-1}\Gamma^2[(1+\mu)/2]$, where $\Gamma(x)$ is the Euler function, we obtain

$$f(x) = x\mathrm{Im}\{[(m_\downarrow/m_\uparrow)\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)]^{ix}\Gamma^2(ix)\}. \qquad (64)$$

Since [22], for $z \to 0$, we have $\Gamma(z) \simeq 1/z - C$, this result gives back exactly Eq. (47) for $\bar{a}_3 = f(0)$, which shows the coherence of our approximate treatment.

It is possible to write Eq. (64) in a simpler form at the price of a small approximation, by making use of the Stirling expansion of the Euler function $\ln\Gamma(z) \simeq (z-1/2)\ln z - z + (1/2)\ln(2\pi)$. Writing $\Gamma^2(ix) = |\Gamma(ix)|^2[\Gamma(ix)/\Gamma(-ix)]$, where [22] $|\Gamma(ix)|^2 = \pi/[x\sinh(\pi x)]$, with $\Gamma(ix)/\Gamma(-ix) = -\Gamma(1+ix)/\Gamma(1-ix)$, and making use of the Stirling expansion for $\Gamma(1 \pm ix)$, we find

$$f(x) \simeq \frac{\pi}{\sinh(\pi x)} \sin\left[\left(b + 2 - \ln(1+x^2) - \frac{\arctan x}{x}\right)x\right], \qquad (65)$$

with the notation

$$b \equiv \ln(m_\uparrow/m_\downarrow) - \ln[\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)]. \qquad (66)$$

This result is an excellent approximation for Eq. (64), except in the vicinity of $x = 0$ because it gives $f(0) = b + 1$ instead of $f(0) = b + 2C$, which is still a very good approximation since $2C \simeq 1.154$. This small deficiency comes from the Stirling expansion in the vicinity of $z = 1$. We may correct for it by replacing 2 with $1 + 2C$. This leads to

$$f(x) \simeq \frac{\pi}{\sinh(\pi x)} \sin\left[\left(b + 1 + 2C - \ln(1+x^2) - \frac{\arctan x}{x}\right)x\right], \qquad (67)$$

which is almost indistinguishable from Eq. (64), for any sizable value of b. This can be seen from Fig. 3 where, for $m_\uparrow/m_\downarrow = 10^2$ corresponding to $b \simeq 3.08$, we have plotted both Eq. (64) and Eq. (67). They are undistinguishable in the figure. We have also plotted the exact solution of the first-order approximation Eq. (31), for small $m_\downarrow/m_\uparrow$, of the exact starting

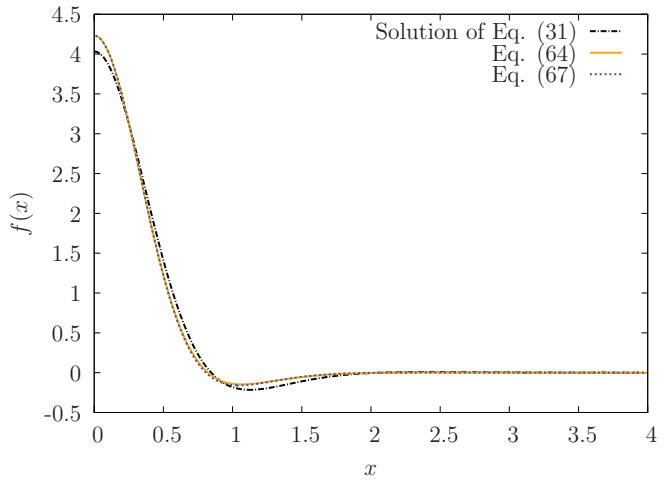


FIG. 3. (Color online) For $m_\uparrow/m_\downarrow = 10^2$ corresponding to $b \simeq 3.08$. Solid line, Eq. (64); dotted line, Eq. (67); dash-dotted line, exact numerical solution of Eq. (31).

equation [Eq. (3)]. The agreement is very good. The only sizable difference is again in the vicinity of $x = 0$ because the asymptotic form [Eq. (47)] $\bar{a}_3 = b + 2C$ is, for this value of $m_\uparrow/m_\downarrow = 10^2$, still slightly different from the result obtained from Eq. (31) [or equivalently Eq. (37)] and Eq. (3), as is seen from Fig. 1. This could be completely corrected by replacing, in Eq. (67), $b + 2C$ with the exact $\bar{a}_3$. This would provide an excellent approximation to the exact solution of the original Eq. (3). Finally, we have also checked that this expression [Eq. (67)] satisfies the sum rule Eq. (5) with a remarkable precision, as can be seen from Fig. 4.

This explicit result [Eq. (67)] shows that $f(x)$ decreases very rapidly, with an oscillatory behavior in an exponentially decreasing envelope. This function is almost zero after the first zero, except for a small oscillation just after this zero. For large b, this zero is small and is given essentially by $x_0 = \pi/(b + 2C) = \pi/\bar{a}_3$. Hence, we find explicitly a result coherent with our starting hypothesis, namely, that $f(x)$ gets

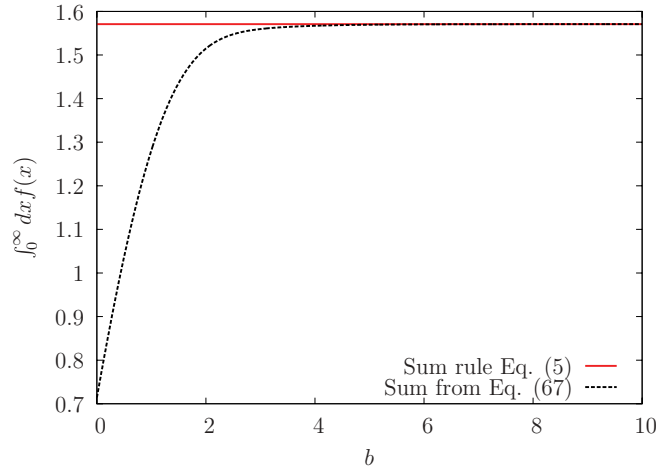


FIG. 4. (Color online) Integral of Eq. (67) as a function of $b = \ln(m_\uparrow/m_\downarrow) - \ln[\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)]$ compared to the exact result $\pi/2$ from the sum rule Eq. (5).

very narrow for large $\bar{a}_3$. Actually, the behavior resulting from Eq. (64) for extremely large x is not the correct one because we have made approximations for the low-k behavior of $\bar{f}(k)$. As we mentioned earlier, this behavior is rather $f(x) \sim 1/x^{1+1/\epsilon}$ without any oscillation. However, since $f(x)$ is extremely small in this regime anyway, this is completely unimportant in practice. We note that all our preceding analytical findings are in excellent agreement with the very recent numerical work of Iskin [17]. A final point, also in agreement with the work of Iskin [17], is that the first zero disappears (by coalescence with the second one) when b decreases. This feature is fairly natural since, when $m_\downarrow$ goes to infinity, the solution is the Lorentzian found in Sec. III, which has no zero. Indeed, the argument of the sinus in Eq. (67) is an increasing function of x for small x, but decreases for large x. The first zero disappears when this argument reaches its maximum as a function of x and is equal to π at this maximum. This occurs for $x_0 = 2.33$ and $b = 1.55$, corresponding to $m_\uparrow/m_\downarrow = 11.6$. This feature is again in very nice agreement with the full numerical solution [17] of Eq. (3), although it is not very good quantitatively since the zero is found to disappear for $m_\uparrow/m_\downarrow \simeq 7$ corresponding to $b = 1.28$. This small quantitative disagreement is expected since this mass ratio does not correspond to the full asymptotic regime of very small $m_\downarrow$.

We note finally that, if we are not interested in the disappearance of the zeros and rather concentrate on the regime where $\bar{a}_3$ is quite large, $f(x)$ can be further simplified into a very simple expression. Indeed, we may assume that x is fairly small since otherwise, from Eq. (67), $f(x)$ is extremely small, compared to its $x = 0$ value, and its specific expression becomes unimportant. In this case we have $\ln(1 + x^2) \simeq 0$ and $\arctan x/x \simeq 1$. Taking into account $\bar{a}_3 = b + 2C$, Eq. (67) reduces to

$$f(x) = \frac{\pi}{\sinh(\pi x)} \sin(\bar{a}_3 x). \tag{68}$$

First this expression satisfies $f(0) = \bar{a}_3$. Then with this very simple form the integral in the sum rule [Eq. (5)] can be calculated analytically. One finds $(\pi/2)\tanh(\bar{a}_3/2)$, which, for large $\bar{a}_3$, is $\pi/2$, as it should be. Furthermore, when the right-hand side of Eq. (6) is calculated analytically one finds, to dominant order, the result $\bar{a}_3 e^{-\bar{a}_3}$. This is in perfect agreement with the left-hand side of Eq. (6) since $f(0) = \bar{a}_3$ and, to dominant order, $R/2 = r = m_\downarrow/m_\uparrow \simeq e^{-\bar{a}_3}$ from Eq. (47). Hence, since $\bar{a}_3$ is large, we have an almost complete cancellation of the two terms on the right-hand side of Eq. (6), whereas a simple order of magnitude evaluation would rather give a comparatively much larger result of order $(1/\bar{a}_3)^2$. It is thus quite remarkable that the nontrivial property Eq. (6) is satisfied by the simple expression Eq. (68).

V. CONCLUSION

In this paper we have considered the problem of the scattering length a_3 for a fermion of mass $m_\uparrow$ colliding with a dimer, formed from a fermion identical to the incident one and another different fermion of mass $m_\downarrow$. The only scattering parameter in this problem is the scattering length a between the different fermions. We have been interested in the way in which this scattering length depends on the mass ratio $m_\downarrow/m_\uparrow$

between the different fermions. The experimental investigation of these kind of systems is under current development in several laboratories around the world. While the answer to this problem is obtained from a generalization of an integral equation first explored by Skorniakov and Ter-Martirosian [14] (STM), which has been fully investigated numerically, we have been interested in an analytical investigation of this problem and this equation in order to gain additional insight and open possible roads for more complex problems.

We have been able to perform this investigation in the limiting cases where the mass ratio is very large or very small. When the mass $m_\downarrow$ of the lonely fermion is very large, the situation is very similar to the one where it is infinite and where the corresponding atoms behave as a fixed scattering center. In this case we have found the analytical solution of the STM integral equation. The corresponding scattering length is merely a. The existence of another fermion in a bound state (i.e., the existence of the dimer) is unimportant and, physically, everything happens as if the fermion is merely scattering on the fixed center. It is noteworthy that the equal mass case $m_\downarrow = m_\uparrow$, where $a_3/a \simeq 1.18$, is fairly near this limiting case.

When the mass $m_\downarrow$ is very small, the atom-dimer scattering length a_3 goes to infinity. We have found that in this situation the width of the unknown function in the generalized STM equation becomes very narrow around the origin. We have used this feature to expand properly the STM equation in this case. We have in this way obtained the explicit asymptotic behavior of a_3 in this large $m_\uparrow/m_\downarrow$ regime. We have found

$$\frac{a_3}{a} \simeq \ln(m_\uparrow/m_\downarrow) - \ln[\ln(m_\uparrow/m_\downarrow)] + 2C, \tag{69}$$

where C is the Euler constant. In addition, we have found a parametric representation of a_3 in terms of $m_\uparrow/m_\downarrow$, which is even more accurate at lower $m_\uparrow/m_\downarrow$ and gives an excellent agreement with the exact numerical results over the whole range $m_\uparrow/m_\downarrow \gtrsim 7$. At the same time we have found an excellent approximate analytical solution for the unknown function in the STM equation in this same regime. In particular, this solution displays the same appearance of zeros and oscillations as is found in the numerical results of the exact equation for $m_\uparrow/m_\downarrow \gtrsim 7$. This is in contrast with the shape of this solution for lower $m_\uparrow/m_\downarrow$, which is merely found to decrease monotonously to zero.

APPENDIX: INTERPRETATION OF THE INTEGRAL RELATION EQ. (5)

In this appendix, we show in detail the connection between the integral relation [Eq. (5)] and the fact that two spin-up particles cannot be at the same position. In order to do so, we need to make the connection between the function $\bar{a}_3(\bar{p})$ of Eq. (2) and the wave function $f(\mathbf{r})$ studied by Petrov [18]. We keep his notations, so we emphasize that in this appendix, contrary to the rest of the article, f is a wave function defined in Eq. (A1) in what follows.

We first recall the notations and results of [18]. The system we study is made of two spin-up particles (positions $\mathbf{x}_1$ and $\mathbf{x}_2$) and a single spin-down particle (position $\mathbf{x}_3$). We want to describe the scattering between a spin-up particle and a dimer in the limit of zero incident energy. The total energy E is therefore equal to the binding energy $E = -1/(2\mu a^2) < 0$. In the limit where the spin-down particle of position $\mathbf{x}_3$ is close to the spin-up particle of position $\mathbf{x}_2$, the wave function Ψ is given by

$$\Psi \sim \frac{f(\mathbf{r})}{4\pi}\left(\frac{1}{r_\perp} - \sqrt{|E|}\right), \tag{A1}$$

where $\mathbf{r}_\perp = 2\sqrt{m_\uparrow}(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2)$. In the limit $\mathbf{x}_2 \to \mathbf{x}_3$, the vector $\mathbf{r}$ is given by $\mathbf{r} = \sqrt{m_\uparrow}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)/\sin\theta$ (therefore, $\mathbf{r}$ has the dimension of a length multiplied by the square root of a mass, or equivalently, of the inverse square root of an energy, since we take $\hbar \equiv 1$). The angle θ is given by $\tan\theta = \sqrt{1 + 2m_\uparrow/m_\downarrow}$. In Ref. [18], the following linear homogeneous equation for $f(\mathbf{r})$ was derived:

$$4\pi \int d\mathbf{r}' \{G_E[\sqrt{\mathbf{r}^2 + \mathbf{r}'^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'\cos(2\theta)}]f(\mathbf{r}') + G_E(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)[f(\mathbf{r}) - f(\mathbf{r}')]\} = 0, \tag{A2}$$

with $G_E(|\mathbf{X}|) = \int \frac{d^6\mathbf{K}}{(2\pi)^6} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{X}} \frac{1}{(|E| + \mathbf{K}^2)}$. We can Fourier transform Eq. (A2) and we find

$$\int \frac{d^3\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \frac{f(\mathbf{q}')}{[|E|\sin^3\theta + (\mathbf{q}^2 + \mathbf{q}'^2 - 2\cos\theta\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{q}')\sin\theta]} + \frac{1}{4\pi}[\sqrt{|E| + \mathbf{q}^2} - \sqrt{|E|}]f(\mathbf{q}) = 0. \tag{A3}$$

Next, we define the function g such that

$$f(\mathbf{q}) \equiv (2\pi)^3\delta(\mathbf{q}) - \frac{4\pi}{\mathbf{q}^2}\gamma g(\gamma\mathbf{q}), \tag{A4}$$

where γ is a constant which is unknown *a priori*. Inserting Eq. (A4) in Eq. (A3), we find that we must take $\gamma = 2a\sqrt{m_\uparrow}/\sqrt{1 + 2m_\uparrow/m_\downarrow}$ in order to recover Eq. (2). We thus have $g(\bar{\mathbf{q}}) = \bar{a}_3(\bar{\mathbf{q}})$.

Integrating Eq. (A4), we can now express the integral relation [Eq. (5)] for $\bar{a}_3$ in terms of the function $f(\mathbf{r})$

$$\int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} f(\mathbf{q}) = 1 - \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{\mathbf{q}^2}\gamma g(\gamma\mathbf{q}) = f(\mathbf{r} = 0) = 1 - \frac{2}{\pi}\int_0^\infty d\bar{q}\bar{a}_3(|\bar{q}|). \tag{A5}$$

However, $\mathbf{r} = 0$ corresponds to the situation where the two spin-up particles are at the same position ($\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$) and therefore the wave function Ψ, hence f, must vanish due to the Pauli exclusion principle : $f(\mathbf{r} = 0) = 0$. From Eq. (A5), we see that we must have

$$\int_0^\infty d\bar{q}\bar{a}_3(|\bar{q}|) = \frac{\pi}{2}, \tag{A6}$$

which is precisely Eq. (5). As a consequence, we see that the integral relation [Eq. (5)] is simply equivalent to the statement that two spin-up particles cannot be at the same position in space. This also means that it is not expected to be correct for three identical bosons, for instance.

[1] For a very recent review, see S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).
[2] R. Casalbuoni and G. Nardulli, Rev. Mod. Phys. **76**, 263 (2004).
[3] S.-T. Wu, C.-H. Pao, and S.-K. Yip, Phys. Rev. B **74**, 224504 (2006); C.-H. Pao, S.-T. Wu, and S.-K. Yip, Phys. Rev. A **76**, 053621 (2007).
[4] M. M. Parish, F. M. Marchetti, A. Lamacraft, and B. D. Simons, Phys. Rev. Lett. **98**, 160402 (2007).
[5] J. von Stecher, C. H. Greene, and D. Blume, Phys. Rev. A **76**, 053613 (2007); D. Blume, *ibid.* **78**, 013613 (2008).
[6] M. A. Baranov, C. Lobo, and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. A **78**, 033620 (2008).
[7] G. Orso, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Phys. Rev. A **77**, 033611 (2008).
[8] I. Bausmerth, A. Recati, and S. Stringari, Phys. Rev. A **79**, 043622 (2009).
[9] R. B. Diener and M. Randeria, Phys. Rev. A **81**, 033608 (2010).
[10] M. Taglieber, A.-C. Voigt, T. Aoki, T. W. Hansch, and K. Dieckmann, Phys. Rev. Lett. **100**, 010401 (2008).
[11] E. Wille *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 053201 (2008).
[12] A. Gezerlis, S. Gandolfi, K. E. Schmidt, and J. Carlson, Phys. Rev. Lett. **103**, 060403 (2009).
[13] D. Blume and K. M. Daily, Phys. Rev. Lett. **105**, 170403 (2010); S. Gandolfi and J. Carlson, e-print arXiv:1006.5186.
[14] G. V. Skorniakov and K. A. Ter-Martirosian, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **31**, 775 (1956) [Sov. Phys. JETP **4**, 648 (1957)].
[15] I. V. Brodsky, A. V. Klaptsov, M. Yu. Kagan, R. Combescot, and X. Leyronas, JETP Lett. **82**, 273 (2005); Phys. Rev. A **73**, 032724 (2006).
[16] M. Iskin and C. A. R. Sá de Melo, Phys. Rev. A **77**, 013625 (2008).
[17] M. Iskin, Phys. Rev. A **81**, 043634 (2010).
[18] D. S. Petrov, Phys. Rev. A **67**, 010703(R) (2003).
[19] X. Leyronas and R. Combescot, Phys. Rev. Lett. **99**, 170402 (2007); R. Combescot and X. Leyronas, Phys. Rev. A **78**, 053621 (2008); F. Alzetto and X. Leyronas, *ibid.* **81**, 043604 (2010).
[20] O. I. Kartavtsev and A. V. Malykh, J. Phys. B **40**, 1429 (2007); JETP Lett. **86**, 625 (2007).
[21] V. Efimov, Phys. Lett. B **33**, 563 (1970); E. Braaten and H. W. Hammer, Phys. Rep. **428**, 259 (2006).
[22] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, San Diego, 1980).

Résumé

Cette thèse traite du problème à N corps dans les gaz de fermions ultra froids. La première partie est dédiée aux collisions à 3 et 4 fermions en interaction de contact dans le vide. Nous montrons comment calculer diagrammatiquement l'amplitude de diffusion dimère-fermion et la longueur de diffusion dimère-dimère. Par un développement en puissances du rapport des masses et à basse énergie, nous obtenons une expression analytique de l'amplitude de diffusion dimère-fermion en onde s dans la limite de grand rapport des masses entre deux espèces. En utilisant la même méthode, nous obtenons un développement analytique de la longueur de diffusion dimère-dimère en onde s dans la limite de grand rapport des masses entre deux espèces. Dans la seconde partie, nous considérons le problème à N corps dans la transition BEC-BCS. Nous dérivons la formule de Tan dans la limite d'interaction de contact, puis nous généralisons ce résultat à des mélanges bosoniques ainsi qu'à 2 dimensions. Nous calculons également l'équation d'état à l'unitarité dans l'approximation de la matrice T en utilisant 3 formules exactes pour l'énergie. Finalement, nous obtenons un développement de l'équation d'état en puissances de la densité dans la limite BEC. Le résultat est obtenu, dans le cas général où les deux espèces ont des masses différentes et sont présentes en quantité différente, en prenant en compte diagrammatiquement les vertex de diffusion à 3 et 4 corps exacts.

Mots-clefs : Gaz de fermions ultra froids, Transition BEC-BCS, Problème à 3 corps, Problème à 4 corps, Développement diagrammatique, Amplitude de diffusion en onde s, Longueur de diffusion en onde s, Formule de Tan, Équation d'état, Limite BEC, Unitarité

Abstract

This thesis deals with the N body problem in ultra cold Fermi gases. The first part presents collisions between 3 and 4 fermions in contact interaction in vacuum. We show how to calculate diagrammaticaly the dimer-fermion scattering amplitude and the dimer-dimer scattering length. Using a development in power of the mass ratio, we get an analytical expression for the dimer-fermion s wave scattering amplitude in the large mass ratio limit between two species. Using the same method, we get an analytical expression for the dimer-dimer s wave scattering length in the large mass ratio limit between two species. In the second part, we consider the many body problem in the BEC-BCS crossover. We derive the Tan's formula for the energy in the contact interaction limit, then we generalize this result for bosonic mixtures and for 2 dimensions systems. We also calculate the equation of state at unitarity with the T matrix approximation using 3 exact formulas for the energy. Finally, we obtain a development for the equation of state in the BEC limit in power of the density. The result is obtained, in the general case where two species have different masses and unequal numbers, by considering diagrammaticaly the exact 3 and 4 body vertices.

Keywords : Ultra cold Fermi gases, BEC-BCS crossover, 3 body problem, 4 body problem, Diagrammatic expansion, s wave scattering amplitude, s wave scattering length, Tan's formula, Equation of State, BEC limit, Unitarity