



HAL
open science

Quelques problèmes à petit nombre d'atomes froids dans des guides d'onde.

Tom Kristensen

► **To cite this version:**

Tom Kristensen. Quelques problèmes à petit nombre d'atomes froids dans des guides d'onde.. Physique [physics]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2015. Français. NNT : 2015PA066363 . tel-01267179

HAL Id: tel-01267179

<https://theses.hal.science/tel-01267179>

Submitted on 4 Feb 2016

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.

**THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE**

Spécialité : Physique

École doctorale : « Physique en Île-de-France »

réalisée

au Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée

présentée par

Tom KRISTENSEN

pour obtenir le grade de :

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

Sujet de la thèse :

**Quelques problèmes à petit nombre d'atomes froids
dans des guides d'onde**

soutenue le 18 septembre 2015

devant le jury composé de :

M.	Andrea Simoni	Rapporteur
M^{me}	Anna Minguzzi	Rapporteuse
M.	Ludovic Pricoupenko	Directeur de thèse
M.	Vincent Lorent	Président du jury
M.	Xavier Leyronas	Examinateur
M.	Yvan Castin	Examinateur

Table des matières

Introduction	vii
1 Éléments de la théorie de la diffusion	1
1.1 Les interactions	1
1.2 Collision binaire élastique	2
1.3 Dimères	3
1.4 L'approximation de portée nulle et le pseudo-potentiel	4
1.5 Modèles de Wigner-Bethe-Peierls et de portée effective	5
1.6 Filtrage en ϵ	5
2 Le modèle à deux voies	9
2.1 Présentation du modèle à deux voies	9
2.2 Pertinence de ce modèle	10
2.3 Hamiltonien du modèle à deux voies	10
2.4 Liens entre paramètres du modèle à deux voies et expérimentaux	13
2.5 Contribution de la voie moléculaire dans le produit scalaire	14
3 Collisions dans un guide d'onde	17
3.1 Modèles purement uni- et bidimensionnels	17
3.2 Limite des modèles purement unidimensionnels	19
3.2.1 Quelques expériences en dimension réduite	19
3.2.2 Longueurs de diffusion dans un guide d'onde	21
3.3 Guide d'onde	22
3.3.1 Potentiel harmonique	22
3.3.2 États propres	24
3.3.3 Régime monomode	25
3.4 Matrice de transition dans un guide d'onde	26
3.4.1 Guide d'onde bidimensionnel	26
3.4.2 Guide d'onde unidimensionnel	27
3.5 Déphasages dans un guide d'onde	27
3.5.1 Difficultés pour définir les déphasages	28
3.5.2 Définition des déphasages	28
3.6 Paramètres de la diffusion monomode dans un guide d'onde	30
3.6.1 Lien avec les paramètres 3D	30
3.6.2 Condition de contact uni- et bidimensionnelle	31

3.7	Énergie des dimères	32
3.7.1	Dimères du modèle à deux voies tridimensionnel	32
3.7.2	Dimères du modèle à deux voies dans un guide d'onde harmonique	32
3.7.3	Comparaison entre les dimères prédits par les différents modèles	33
3.8	Voisinage de la résonance 1D	36
Article 1 : Ultracold-atom collisions in low dimensions : A two-channel analysis		39
4	Portée effective 1D et écart à l'intégrabilité	53
4.1	Introduction	53
4.2	Diffusion unidimensionnelle	55
4.2.1	Généralités	55
4.2.2	Modèles de portée effective	55
4.2.3	État lié à deux corps	56
4.2.4	Modèle de contact pour un système de N atomes	57
4.3	Résultats connus pour les modèles de contact à N corps	58
4.3.1	Hamiltonien	58
4.3.2	Diagramme de phase du secteur pair	59
4.3.3	Mise en correspondance bosons-fermions	60
4.3.4	Régime de Tonks-Girardeau fermionique	60
4.4	Intégrabilité des modèles de portées effectives	62
4.5	Modèles à deux voies unidimensionnels	62
4.5.1	Hamiltonien	62
4.5.2	Amplitude de diffusion	63
4.5.3	Équation intégrale	64
4.6	Écart à l'intégrabilité	65
4.6.1	Critère de Yang-Baxter-McGuire	65
4.6.2	Ansatz de Bethe pour un modèle de portée effective	66
4.6.3	L'ansatz de Bethe est-il solution de l'équation intégrale?	67
4.6.4	Équivalence des modèles pour le problème à trois corps	68
4.6.5	Étude numérique du spectre des états liés à trois corps	68
4.7	Diffusion atome-dimère	70
4.7.1	Ansatz	70
4.7.2	Équation intégrale pour la diffusion atome-dimère	71
4.7.3	Lois limites	72
4.8	États liés dans le secteur pair dans une boîte	73
4.8.1	Filtrage en ϵ	73
4.8.2	Deux atomes dans une boîte	74
4.8.3	État fondamental de trois bosons dans une boîte	76
Annexe		81
4.A	Intégrabilité et ansatz de Bethe	81
Article 2 : One-dimensional ultracold atomic gases : impact of the effective range on the integrability		83

5 Coefficient du viriel	91
5.1 Introduction	91
5.2 Modèle à deux voies dans un guide d'onde	93
5.2.1 Hamiltonien	93
5.2.2 Nombres de particules conservées	95
5.2.3 Équilibre chimique et grand potentiel	95
5.3 Développement en cumulants et développement du viriel	96
5.3.1 Développement en cumulants	96
5.3.2 Développement du viriel	98
5.4 Gaz sans interaction dans un guide d'onde	99
5.5 Gaz en interaction : la formule de Beth et Uhlenbeck	100
5.6 Peut-on utiliser la démonstration de B-U dans un guide d'onde?	101
5.7 Approche diagrammatique	101
5.7.1 Fonction de Green en temps imaginaire	102
5.7.2 Représentation interaction	103
5.7.3 Fonctions de Green à l'ordre 0	104
5.7.4 Interaction directe du modèle à deux voies	105
5.7.5 Couplage de Feshbach du modèle à deux voies	107
5.7.6 Règles de Feynman pour le modèle à 2 voies	109
5.7.7 Matrice de transition	110
5.7.8 Voie ouverte	112
5.7.9 Voie moléculaire	112
5.8 Développement de la densité en puissances de la fugacité	113
5.8.1 Principe de la méthode	113
5.8.2 Nombre d'atomes et de molécules	113
5.8.3 Développement en puissances de la fugacité	115
5.9 Résultats	117
5.9.1 Cumulants sans interaction	117
5.9.2 La formule de Beth et Uhlenbeck retrouvée	118
5.9.3 Limite de portée nulle	120
Annexes	121
5.A La formule de Beth et Uhlenbeck	123
5.B Théorème de Wick	125
5.C Signe de la contribution à l'ordre n de l'interaction directe	125
5.D Signe de la contribution à l'ordre n du couplage de Feshbach	127
5.E Calcul de diagrammes	128
5.E.1 Diagramme 1	129
5.E.2 Diagramme 2	130
5.E.3 Diagramme 3	132
5.E.4 Diagramme 4	133
5.F Transformation de Laplace	134
5.F.1 Définitions	134
5.F.2 Théorème de convolution	134

Bibliographie

139

Remerciements

Voici, pour commencer ce manuscrit, la partie la moins importante et à la fois la plus importante. La moins importante car elle ne contient pas de résultat physique. La plus importante, d'une part parce qu'elle sera sans doute la partie la plus lue, et d'autre part parce que la recherche ne peut pas se faire seul. Je voudrais donc remercier ici les nombreuses personnes sans lesquelles les résultats présentés ici auraient été différents, voire n'auraient pas existé.

Tout d'abord, je souhaite remercier chaleureusement tous les membres de mon jury. Je pense à Anna Minguzzi et Andrea Simoni qui ont accepté de lire en détail ce manuscrit et de me donner de nombreuses remarques, Vincent Lorent, qui a présidé ce jury avec tout son enthousiasme, et Yvan Castin pour sa relecture très attentive de ce manuscrit ainsi que pour les critiques constructives qui en ont découlé.

Je voudrais également remercier vivement Xavier, aussi bien pour nos discussions de physique, en particulier sur les diagrammes de Feynman, que pour sa bienveillance. Ce fut un réel plaisir de travailler avec lui.

Enfin, je tiens à remercier énormément Ludovic pour avoir été très présent malgré ses nombreuses obligations administratives et m'avoir ainsi transmis ses connaissances aussi bien sur les atomes froids, sur la communauté scientifique associée, que sur la pédagogie en générale. J'ai été très heureux d'avoir passé ces années sous sa direction et d'avoir ainsi appris à *ne pas oublier de me méfier*.

Durant ces trois dernières années, j'ai eu la chance d'enseigner à l'UPMC. Je voudrais ainsi remercier Alice Sinatra qui m'a donné l'opportunité de pouvoir être chargé de TD en mécanique quantique, ainsi de Dan Israel et François Malet, mes co-TD-men, avec qui j'ai été ravi de travailler.

Et comme l'important, ce n'est ni le but, ni même le chemin, mais les gens avec qui on le parcourt, je souhaiterais remercier ici les nombreuses personnes avec lesquelles j'ai sillonné cette route.

Tout d'abord, un grand merci¹ aux collègues du LPTMC, en particulier à Annie, Axelle, Boris, Can, Carlo, Delphine, Diane, Julien Piera, Julien Rip', Julian, Liliane, Sylvie, Thiagos . . . pour les repas et les pauses café-thé-chocolat.

Je voudrais également remercier Vivien et Nayélie pour nos repas (et plus), ainsi que les Cachanais expatriés à Jussieu : Antony, Véra et Léonard.

Dans une telle aventure, il est important de pouvoir compter sur sa famille et j'ai la chance d'en avoir trois. Ma famille loir-et-chérienne : ma maman et François, Marion, Guillaume et Mathias. Ma famille réginaburgienne de TamTam Week-end : JaiL le

1. Par ordre de préférence alphabétique.

Groënlandais, Cab, la Grande Dame du Mans, Docteur Marien Simeni Simeni Junior, dit le Bien-nommé, et ce à juste titre, et pour de très très bonnes raisons, l'homme fort de Yaoundé, S', l'enfant terrible de Puteau-City, Moutmout l'observateur d'oiseaux, Renaud D, l'enfant terrible de Puteau-City (encore un), Charlène N'Art. Ma belle-famille orléanaise : AM et JJ, Marion et Guillaume (bis), Elsa, Alain.

Nietzsche a écrit² : « Ohne Musik wäre das Leben ein Irrtum ». Je voudrais remercier tous mes amis musiciens (et bien plus) des PAMs³ : Romain(s)×2, Pierre G, Boutinus, Pascal, Audrey, Marina, Corentin, PAT, Émilien, Rémy, Loupio, Lap', Florent, Aurélien, MAM, Claire, Camille, Clément, Clélia, Guilhem, Marjorie, Rouge & Jaune, Pierre L., Cécile Rep', Mémé, Stéphanie, Grégoire, Alexis, Nathanael, Élisabeth, Sylvain, PAD, Mathias, Céline, et tous les autres qui, tels des bémols, ont été accidentellement oubliés.

Pour continuer les citations, je dirais, en accord avec Dick Annegarn, que « rien ne vaut le vélo » – et d'en profiter pour saluer mes camarades cyclistes du matin et du soir : Élisabeth, Romain, Pierre.

Enfin, des remerciements à quelques amis Cartésiens, Cachanais ou autre : Francis, Thérèse et autres MPSI2, Georges Taverne, Blet, Ernst, Kioumars, Élise, Marie C, Niarff, Marion Sierra, Pauline, Lilia, Julien Fostier. Et une mention spéciale à C. D. qui est venu à la soutenance spécialement pour poser une question . . .

Et pour finir, « le verbe *aimer* est difficile à conjuguer, le passé n'est jamais simple, son présent est imparfait, son futur est conditionnel ayé ». Alors merci à Noémie pour tout.

2. Parce qu'il faut toujours citer Nietzsche.

3. Classé par ordre de puissance sonore

Introduction

Le monde surprenant des atomes froids. Le domaine des atomes froids permet d'explorer une physique extraordinairement riche. En particulier, il existe toute une panoplie d'outils qui ont permis d'accomplir des progrès décisifs dans la compréhension des gaz quantiques. Il est possible, entre autres, de mélanger des atomes de masses ou de statistiques différentes, ou encore de confiner fortement le gaz dans des guides d'onde jusqu'à atteindre des dimensions réduites (1D ou 2D) [1]. Il est également possible de changer les effets des interactions grâce au cadeau de la nature que sont les résonances de Feshbach [2]. Tous ces mécanismes permettent d'explorer une très grande diversité de régimes quantiques dégénérés.

Les gaz d'atomes froids sont des milieux très dilués, dont la densité – de l'ordre de 10^{13} à 10^{15} atomes par cm^3 – est très inférieure à celle de l'air ambiant, qui est de 10^{19} molécules par cm^3 . La distance moyenne entre deux atomes ainsi que la longueur d'onde de de Broglie sont donc toujours beaucoup plus grande que la taille typique des interactions, appelée rayon de van der Waals (R_{vdW}) qui est de quelques dizaines de nanomètres.

Tour d'horizon des thématiques abordées

Interactions effectives et lois universelles. Grâce à cette séparation d'échelle ainsi qu'à la faible température, les interactions à deux corps peuvent être très bien modélisées par des interactions effectives dépendant de peu de paramètres. Par exemple, le pseudo-potential de Fermi-Huang ne possède comme paramètre servant à décrire les interactions que la longueur de diffusion.

L'utilisation de ces interactions effectives permet de faire émerger des lois *universelles*, dans le sens où elle ne dépendent pas explicitement des détails des interactions. Ce type d'universalité est présent par exemple dans l'approche de champ classique de Gross-Pitaevskii qui régit la dynamique des condensats de Bose-Einstein (BEC) [3], où quelle que soit l'espèce atomique, l'interaction est paramétrée par une seule longueur : la longueur de diffusion. Cette universalité est également présente dans le problème à petit nombre de corps avec, entre autre, l'effet Efimov dans lequel le spectre des états liés suit une loi géométrique [4, 5].

Résonances de Feshbach. En utilisant le mécanisme de Feshbach, il est possible de contrôler expérimentalement, grâce à un champ magnétique, la longueur de diffusion d'une interaction donnée de façon continue et ainsi d'atteindre des régimes de forte

corrélation. C'est l'un des précieux outils des expériences d'atomes froids, dont l'un des exemples les plus frappants a été l'étude de la transition BEC-BCS pour un gaz de fermions. Au voisinage d'une résonance de Feshbach, une relation simple lie la longueur de diffusion (a), sa valeur hors résonance (a_{bg})⁴, le champ magnétique pour lequel il y a résonance (B_0), ainsi que la largeur de la résonance (ΔB) :

$$a = a_{\text{bg}} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (0.0.1)$$

Lorsque la longueur de diffusion diverge, la section efficace est maximale : il y a une résonance de diffusion.

Il est possible de définir pour chaque résonance de Feshbach une longueur caractéristique notée R^* [6] proportionnelle à l'inverse de ΔB , ce qui permet de définir deux types de résonances. Si R^* est petite par rapport au rayon de van der Waals (ΔB grand), on parle de résonance large – c'est le cas d'une grande partie des résonances étudiées à l'heure actuelle. Au contraire, pour des résonances étroites (ΔB petit), R^* peut prendre des valeurs significativement grandes, ce qui définit une nouvelle échelle d'énergie intermédiaire qui doit être prise en compte [7]. Cette échelle est notamment importante dans le problème à petit nombre de corps. Pour le problème à deux corps, R^* est étroitement lié à la portée effective du potentiel. Pour le problème à trois corps, le paramètre à trois corps de l'effet Efimov dépend de cette longueur. Dans le problème à N bosons résonants, son rôle est primordial [8].

Gaz quantique en dimensions réduites. Un gaz tridimensionnel fortement confiné dans un guide d'onde selon une ou deux directions peut se comporter comme un gaz quasi uni- ou bidimensionnel. Cette propriété est très intéressante, car certaines phases corrélées n'existent qu'en dimension réduite, comme le régime de Tonks-Girardeau [9, 10] pour un gaz unidimensionnel de bosons. Ce système se comporte comme un système fermionique, où la forte interaction répulsive remplace le principe d'exclusion de Pauli. Cette phase prédite dans le contexte de la matière condensée a été observée récemment pour la première fois grâce aux atomes froids [11, 12]. Pour une interaction très fortement attractive, on retrouve cette propriété de forte corrélation pour les états d'énergie positive dans le régime de super-Tonks-Girardeau [13, 14].

La transition entre deux dimensions différentes présente elle aussi un intérêt physique. Par exemple, la transition à la limite unitaire entre les états liés d'Efimov et les deux états liés universels du même système de trois bosons à deux dimensions a été récemment étudiée [15].

En dimension réduite, les résonances ne se produisent pas à la limite où la longueur de diffusion diverge, mais pour d'autres valeurs dépendant des paramètres du confinement. On les appelle ainsi résonances induites⁵ par le confinement [16, 17, 18, 19].

Intégrabilité. Certains systèmes unidimensionnels quantiques sont intégrables et ne peuvent donc pas se thermaliser. Pour un gaz d'atomes froids, l'intégrabilité est liée au fait que l'ansatz de Bethe est solution du problème à N corps. Cet ansatz a été utilisé

4. En anglais, on parle de *background scattering length*, d'où l'indice bg.

5. On devrait cependant plutôt parler de résonances « déplacées ».

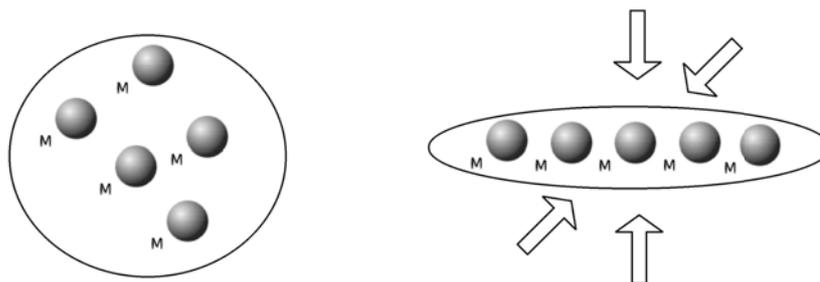


Fig. 0.1 Représentation schématique du confinement d'un gaz tridimensionnel pour atteindre un régime unidimensionnel.

entre autres par Lieb et Liniger pour étudier un système unidimensionnel intégrable de bosons en interactions de contact répulsives [20, 21].

Les systèmes intégrables sont bien compris et ont été étudiés en détail avec les atomes froids. Les voies de recherche actuelles concernent principalement les écarts à l'intégrabilité et les propriétés de thermalisation ou de réactivité chimique qui en découlent [22]. Puisque cette intégrabilité est une propriété uniquement unidimensionnelle, il est possible d'étudier la transition entre un système intégrable et un système non-intégrable, grâce à la transition entre un gaz tridimensionnel et un gaz unidimensionnel [23].

Développement du viriel. L'un des angles d'attaque naturels pour étudier un gaz quantique est de développer son équation d'état en puissance de sa densité : il s'agit du développement du viriel. Ce développement permet de prendre en compte les interactions entre particules et crée un pont entre la physique du petit nombre de corps et la thermodynamique.

Ces coefficients ont été mesurés pour une grande diversité de gaz ultra-froids, ce qui appuie l'intérêt théorique qui leur est porté. Les travaux expérimentaux les plus récents portent sur le gaz de fermions unitaire [24, 25, 26]. De plus, de nombreuses méthodes indépendantes permettent de calculer ces coefficients, par exemple la méthode des déphasages proposée par Beth et Uhlenbeck en 1937 [27] et généralisée avec le formalisme des opérateurs d'Ursell [28, 29, 30, 31] ou celle consistant à calculer les fonctions de partition à N corps, dont les résultats les plus récents concernent le gaz de bosons unitaire [32], de fermions unitaire [33, 34], de fermions unitaire à deux composantes de masses différentes [35], ainsi que le gaz tridimensionnel piégé au voisinage d'une résonance de Feshbach étroite [36].

Une méthode de calcul diagrammatique de ces coefficients du viriel a été développée en 2011 par X. Leyronas [37] afin d'étudier un gaz fermionique. Elle est systématique et permet de calculer les coefficients du viriel pour un ordre donné. Elle a ainsi été appliquée pour analyser un gaz de fermions bidimensionnel [38].

Principaux résultats obtenus

C'est au sein de ces différentes thématiques concernant les gaz d'atomes froids que nous avons cherché à répondre à certaines questions non encore résolues. Un gaz au voisinage d'une résonance de Feshbach étroite n'est souvent pas bien décrit par un modèle effectif qui ne prend en compte que la longueur de diffusion. Nous nous sommes alors demandé s'il existait des régimes similaires, en dimension réduite, où la longueur de diffusion (en dimensions réduites) n'est pas suffisante pour décrire les interactions.

Pour répondre à cette question, nous commençons par donner quelques rappels utiles de la théorie de la diffusion (**chapitre 1**) ainsi qu'une description détaillée du modèle à deux voies qui sera très présent dans ce manuscrit (**chapitre 2**). Puis nous étudions les propriétés collisionnelles d'un gaz quantique confiné dans un guide d'onde (**chapitre 3**) où l'interaction tridimensionnelle est représentée par un modèle à deux voies, qui décrit très bien la physique du mécanisme de Feshbach. Ceci permet d'une part d'obtenir les relations entre les propriétés tridimensionnelles du gaz libre et les propriétés uni- et bidimensionnelles du gaz confiné dans un guide d'onde. D'autre part, nous mettons en évidence un régime (pour des bosons ou des fermions non polarisés), au voisinage d'une résonance unidimensionnelle, où le terme de portée effective est essentiel dans les propriétés de basses énergies [39]. Ce régime peut alors être décrit par une interaction effective purement unidimensionnelle possédant deux longueurs caractéristiques : la longueur de diffusion et la portée effective.

Ce régime et son analogue pour des fermions totalement polarisés ont déjà été étudiés grâce à l'ansatz de Bethe [40, 41, 42] afin d'obtenir des résultats exacts pour le problème à N corps. Cependant, nous montrons que ces systèmes ne sont pas intégrables. Pour cela, nous examinons en détail le problème à trois corps qui est la clef de voûte des propriétés d'intégrabilité (**chapitre 4**). Nous étudions en particulier les écarts à l'intégrabilité dans ce système de trois particules [43].

Bien que le développement du viriel ait déjà été étudié aussi bien pour des systèmes strictement en dimension réduite que pour des gaz confinés dans des pièges harmoniques tridimensionnels, l'évolution de ses coefficients lors de la transition entre un gaz tridimensionnel et un gaz en dimension réduite est encore une question ouverte. De plus, ces coefficients n'ont jamais été calculés avec une modélisation du mécanisme de Feshbach prenant en considération la présence de molécules de Feshbach. En collaboration avec Xavier Leyronas, nous adaptions donc la méthode diagrammatique pour le modèle à deux voies afin de calculer le second coefficient du viriel d'un gaz bosonique ou fermionique non polarisé confiné dans un guide d'onde (**chapitre 5**). Nous trouvons ainsi, pour le second coefficient, une expression de type Beth et Uhlenbeck qui prend en compte le guide d'onde et les contributions des molécules de Feshbach.

Chapitre 1

Éléments de la théorie de la diffusion

Ce chapitre donne quelques notations, définitions et rappels sur la théorie de la diffusion dans des gaz d'atomes froids. La plupart de ces notions sont courantes et pour plus de détails, le lecteur intéressé peut consulter les références [44, 45, 46]. La dernière partie de ce chapitre traite d'une méthode moins connue, le filtrage en ϵ [47, 48], qui sera utilisé dans la partie 4.8 de ce manuscrit.

1.1 Les interactions

Les gaz d'atomes froids étant très dilués, la probabilité d'avoir une collision mettant en jeu plus de deux particules est faible. Bien que ces événements rares soient cruciaux, par exemple pour la compréhension de la durée de vie des gaz froids¹, nous nous limitons dans cette partie aux processus de diffusion binaires. Microscopiquement, l'interaction entre deux atomes de masse m doit être décrite par une multitude de potentiels qui dépendent des états hyperfins des atomes, et dont les positions relatives peuvent être réglées grâce à l'effet Zeeman. Dans le cas des alcalins, il existe deux potentiels (singulet et triplet) auquel il faut ajouter l'interaction hyperfine.

Lorsque deux atomes sont suffisamment loin l'un de l'autre, le potentiel d'interaction entre ces deux particules peut être modélisé par une interaction de van der Waals² :

$$V_{\text{vdW}}(\mathbf{r}) = \frac{-C_6}{r^6}, \quad (1.1.1)$$

ce qui définit une longueur caractéristique³ de l'ordre de quelques nanomètres nommée rayon de van der Waals, ainsi qu'une énergie caractéristique :

$$R_{\text{vdW}} = \frac{1}{2} \left(\frac{mC_6}{\hbar^2} \right)^{1/4} ; \quad E_{\text{vdW}} = \frac{\hbar^2}{mR_{\text{vdW}}^2}. \quad (1.1.2)$$

Cette interaction est de courte portée, dans le sens où $\int_{R_{\text{vdW}}}^{\infty} V_{\text{vdW}}(r)r^2 dr$ est finie.

1. Lors d'une collision à 3 corps, l'une des particules peut recevoir suffisamment d'énergie pour être extraite du piège à la suite d'une collision inélastique créant une molécule.

2. Pour des distances interatomiques supérieures à la longueur d'onde de résonance optique de l'atome, le potentiel de van der Waals est en $1/r^7$.

3. Par exemple $R_{\text{vdW}} = 1,7$ nm pour le ${}^6\text{Li}$ et 5,3 nm pour le ${}^{133}\text{Cs}$ [2].

À courte distance, les nuages électroniques se recouvrent, ce qui crée une force très répulsive, c'est-à-dire un cœur dur. L'interaction dépend alors de l'état interne des atomes. Les différents potentiels sont alors couplés entre eux, ce qui peut entraîner des processus inélastiques. Ces potentiels admettent des états liés dont l'extension spatiale est inférieure au rayon de van der Waals, ce qui sera l'un des points clefs du mécanisme de Feshbach. De telles collisions multi-voies sont simulées numériquement (voir par exemple les références [49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58]).

À partir de maintenant, nous n'examinerons que des processus de diffusion binaires élastiques, c'est-à-dire des collisions où l'état interne de chaque particule avant et après la collision reste le même.

1.2 Collision binaire élastique

On considère deux atomes de masse réduite μ qui diffusent dans l'espace homogène *via* un vrai potentiel d'interaction $V(\mathbf{r})$ isotrope et de courte portée dont l'extension spatiale est de l'ordre de R_{vdW} . Dans le référentiel du centre de masse, l'équation de Schrödinger est :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.2.1)$$

On note l'énergie des états de diffusion $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ et celle des états liés $E = \frac{-\hbar^2 q^2}{2\mu}$. On peut développer asymptotiquement la partie diffusée de la fonction d'onde en ondes partielles⁴ :

$$\psi(\mathbf{r}) \underset{|r| \gg R_{\text{vdW}}}{\simeq} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_s(k)\frac{e^{ikr}}{r} - 3i(\mathbf{e}_{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{r}})f_p(k)\partial_r\left(\frac{e^{ikr}}{kr}\right) + \dots \quad (1.2.2)$$

Dans l'Eq. (1.2.2), les deux vecteurs $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$ et $\mathbf{e}_{\mathbf{r}}$ sont des vecteurs unitaires pointant dans les directions de \mathbf{k} et de \mathbf{r} . Dans la partie droite de cette égalité, le premier terme correspond à une onde plane incidente, le second à une diffusion en onde *s* et le troisième à une diffusion en onde *p*. Les « ... » représentent des ondes diffusées d'ordre supérieur qui sont négligées pour des états de diffusion dont l'énergie est petite par rapport à l'énergie de van der Waals, ce qui est toujours le cas ici. Les indices *s* et *p* font référence à la symétrie des ondes diffusées par analogie avec les états *s* et *p* des atomes hydrogénoïdes. L'onde *s* possède une symétrie sphérique incompatible avec une fonction d'onde fermionique anti-symétrique, c'est pourquoi deux fermions identiques ne diffusent pas dans l'onde *s*. Pour les mêmes raisons, deux bosons identiques ne peuvent pas diffuser dans l'onde *p*.

La forme des amplitudes de diffusion f_s et f_p est imposée par l'unitarité du processus de diffusion, c'est-à-dire par la conservation du nombre de particules entre avant et après la collision :

$$f_s(k) = \frac{1}{g_s(E) - ik} \quad ; \quad f_p(k) = \frac{1}{g_p(E) - ik}. \quad (1.2.3)$$

4. Les solutions exactes de cette équation de Schrödinger sont connues pour certains potentiels $V(\mathbf{r})$ particuliers, par exemple pour le potentiel de van der Waals $V_{\text{vdW}}(\mathbf{r})$ [59, 60].

Il est possible de développer les fonctions $g_s(E)$ et $g_p(E)$ pour des énergies petites par rapport à l'énergie de van der Waals lorsque le potentiel d'interaction décroît exponentiellement avec la distance entre les atomes :

$$g_s(E) = -\frac{1}{a} + \frac{r_e}{2}k^2 + \mathcal{O}(k^4) \quad ; \quad g_p(E) = -\frac{1}{\mathcal{V}_s k^2} - \alpha + \mathcal{O}(k^2). \quad (1.2.4)$$

On appelle a la longueur de diffusion en onde s et \mathcal{V}_s le volume de diffusion en onde p , le coefficient à l'ordre le plus bas dans le dénominateur de l'amplitude de diffusion. Les coefficients suivants r_e et α sont dénommés paramètre de portée effective respectivement en onde s et en onde p . Le terme ik dans l'amplitude de diffusion provient de l'unitarité de la théorie de la diffusion. On parlera donc de limite unitaire lorsque ce terme domine, c'est-à-dire dans l'onde s lorsque $|a| \rightarrow \infty$.

La section efficace de diffusion σ_s dans l'onde s ou σ_p dans l'onde p est directement liée à l'amplitude de diffusion⁵ :

$$\sigma_s = 4\pi|f_s(k)|^2 \quad ; \quad \sigma_p = 12\pi|f_p(k)|^2. \quad (1.2.5)$$

Il y a résonance de diffusion dans l'onde s ou p lorsque la section efficace est maximale, c'est-à-dire lorsque $|a| \gg R_{vdW}$ ou $|\mathcal{V}_s| \gg R_{vdW}^3$. Si l'on considère une diffusion en onde s résonante à très basse énergie ($k \rightarrow 0$), la section efficace tend vers $4\pi|a|^2$ ce qui est beaucoup plus grand que la valeur classique à laquelle on s'attendrait, qui serait $|R_{vdW}|^2$ à un facteur géométrique près.

Tant que l'on s'intéresse à des processus de très basse énergie, on peut, dans de nombreuses situations, résumer l'effet d'un potentiel d'interaction *a priori* très compliqué par seulement quelques paramètres ; c'est là l'une des propriétés importantes que l'on retrouve dans les gaz d'atomes froids.

1.3 Dimères

Un dimère est un état lié à deux corps. L'existence et la valeur de l'énergie de liaison des dimères sont données par certains pôles de l'amplitude de diffusion⁶ de l'équation (1.2.3) considérée comme fonction de l'énergie dans le plan complexe (cf §128 de la référence [46]). Dans l'onde s , un état lié est alors caractérisé par un nombre d'onde $q_{\text{dim}} > 0$ défini par :

$$\frac{1}{f_s(iq_{\text{dim}})} = 0. \quad (1.3.1)$$

L'énergie de l'état lié ainsi que sa fonction d'onde asymptotique (à une constante de normalisation \mathcal{N}_{dim} près) sont alors :

$$E_{\text{dim}} = \frac{-\hbar^2 q_{\text{dim}}^2}{2\mu} \quad ; \quad \psi_{\text{dim}}(\mathbf{r}) \Big|_{|r| \gg R_{vdW}} \simeq \mathcal{N}_{\text{dim}} \frac{\exp(-q_{\text{dim}} r)}{r}. \quad (1.3.2)$$

Dans tout ce manuscrit, nous nous intéressons principalement aux dimères dans l'onde s . Cependant, il est possible de tenir le même raisonnement pour un dimère dans l'onde p (voir par exemple [61] pour plus de détails).

5. Si les particules sont indiscernables, il faut rajouter un facteur 2 à cause des interférences constructives.

6. Ou de façon équivalente, par ceux de la matrice de transition.

1.4 L'approximation de portée nulle et le pseudo-potentiel

Il est possible de remplacer le vrai potentiel d'interaction par un potentiel choisi de façon à ce qu'asymptotiquement, les états de diffusion de ce potentiel aient des expressions très proches de celles du vrai potentiel. Tant que l'on ne s'intéresse qu'à des processus d'énergie petite devant E_{vdW} , on peut choisir un potentiel de portée nulle, c'est-à-dire de support nul. Un exemple d'un tel potentiel est le pseudo-potentiel de Fermi-Huang⁷ :

$$\langle \mathbf{r} | \hat{V} | \psi \rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} a \delta(\mathbf{r}) \partial_r [r\psi(\mathbf{r})]. \quad (1.4.1)$$

En utilisant ce pseudo-potentiel, on trouve *exactement* les états de diffusion suivants :

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{-1}{\frac{1}{a} + ik} \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1.4.2)$$

Une autre méthode très efficace pour implémenter la longueur de diffusion a été proposée dans les années 1930 par Wigner [62] puis par Bethe et Peierls [63] pour traiter du problème de la diffusion neutron-proton⁸. Ce modèle, dit de Wigner-Bethe-Peierls, est équivalent au pseudo-potentiel [64]. Dans cette approche, on considère que les deux atomes vérifient partout l'équation de Schrödinger sans interaction sauf au point de contact, où la fonction d'onde vérifie une condition limite qui filtre les solutions possédant asymptotiquement la même forme que les vraies fonctions d'onde. Il s'agit toujours d'un modèle de portée nulle. Dans le cas d'une diffusion en onde s , il est défini par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{quel que soit } \mathbf{r} \neq 0 \quad : \quad \frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \\ \text{il existe un réel } A \text{ tel que} \quad : \quad \psi(\mathbf{r}) = A \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{r} \right) + \mathcal{O}_{r \rightarrow 0}(r), \end{array} \right. \quad (1.4.3)$$

où la constante A dépend de la position du centre de masse des deux atomes. La deuxième équation du système (1.4.3) est appelée condition de contact.

Cette condition de contact peut également être implémentée en imposant des conditions sur la fonction d'onde et sur sa dérivée. Ce même principe de filtrage donne de façon équivalente à (1.4.3) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{quel que soit } \mathbf{r} \neq 0 \quad : \quad \frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \\ \text{avec la condition de contact} \quad : \quad \lim_{r \rightarrow 0} \left(\partial_r + \frac{1}{a} \right) [r\psi(\mathbf{r})] = 0. \end{array} \right. \quad (1.4.4)$$

Cette approche utilisant la condition de contact sur les dérivées est très efficace pour dériver des résultats dans le problème à N corps et peut être généralisée [47].

7. Ce pseudo-potentiel est également connu sous d'autres noms, comme celui de pseudo-potentiel de Fermi.

8. Bien que développée pour de la matière nucléaire, cette approche est particulièrement fructueuse dans des gaz d'atomes froids, en raison de leurs très faibles densités.

1.5 Modèles de Wigner-Bethe-Peierls et de portée effective

Dans la grande majorité des cas, les potentiels représentant des interactions dans l'onde s ne prennent en considération comme grandeur caractéristique de la vraie interaction que la longueur de diffusion. En effet, les expériences sont effectuées à très faible température et l'énergie relative lors de la collision est suffisamment faible pour que le terme de portée effective soit négligeable. On parle alors de modèle de Wigner-Bethe-Peierls.

Cependant, en particulier dans le cas des résonances de Feshbach étroites, le terme de portée effective peut avoir une importance capitale, même dans une limite de basse énergie. Il est alors nécessaire de prendre en compte ce terme dans le développement du dénominateur de l'amplitude de diffusion [6]; on parle alors de modèle de portée effective. Une grande partie de ce manuscrit s'attache à comprendre les conséquences de l'utilisation de ce modèle.

Le cas des diffusions en onde p est différent. En effet, il n'est généralement pas possible de négliger le paramètre de portée effective [61].

1.6 Filtrage en ϵ

Motivations. Dans les calculs intermédiaires, il est souvent agréable de travailler avec des fonctions régulières au voisinage de $\mathbf{r} = 0$ [47]. Ceci est possible grâce au filtrage en ϵ qui a permis de prédire de nouveaux résultats pour le problème à N bosons [8]. Cette méthode est présentée dans cette partie pour une diffusion en onde s tridimensionnelle et sera utilisée dans la partie 4.8 pour un système de bosons interagissant dans l'onde s dans une boîte unidimensionnelle.

Méthode. On définit le ket $|\delta\rangle$ en représentation de configuration par :

$$\langle \mathbf{r} | \delta \rangle = \delta(\mathbf{r}) \quad (1.6.1)$$

où δ est la distribution de Dirac. L'équation de Schrödinger pour une interaction de portée nulle peut se réécrire :

$$\left(\hat{H} - E \right) |\psi\rangle = -|S_\psi\rangle \otimes |\delta\rangle, \quad (1.6.2)$$

où le ket $|\delta\rangle$ agit sur les variables relatives entre les deux particules et où $|S_\psi\rangle$ appartient au sous-espace de Hilbert du centre de masse. Sa valeur dépend également du ket propre $|\psi\rangle$ et est déterminée grâce à la condition de contact.

On définit alors une suite de fonctions régulières qui tend vers la distribution de Dirac quand un paramètre arbitraire ϵ tend vers zéro :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} |\delta_\epsilon\rangle = |\delta\rangle. \quad (1.6.3)$$

Il existe une multitude de choix pour de telles fonctions, mais pour des raisons pratiques

de calcul, on se limite au choix de fonctions gaussiennes normalisées^{9 10} :

$$\langle \mathbf{r} | \delta_\epsilon \rangle = \frac{1}{(\epsilon\sqrt{\pi})^3} \exp(-r^2/\epsilon^2) \quad ; \quad \langle \mathbf{k} | \delta_\epsilon \rangle = \exp\left(-\frac{k^2\epsilon^2}{4}\right), \quad (1.6.4)$$

où l'on a utilisé la convention pour la transformation de Fourier :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (1.6.5)$$

On remplace alors le second membre de l'équation (1.6.2) par ces nouvelles fonctions, on effectue les calculs pour ϵ fixé, puis on passe à la limite $\epsilon \rightarrow 0$ à la fin des calculs :

$$\left(\hat{H} - E\right) |\psi_\epsilon\rangle = -|S_\psi\rangle \otimes |\delta_\epsilon\rangle, \quad (1.6.6)$$

où les fonctions $|\psi_\epsilon\rangle$ convergent vers $|\psi\rangle$ dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$. Le point clef de cette méthode est la commutation entre les limites $\epsilon \rightarrow 0$ et $r \rightarrow 0$. La solution de l'équation (1.6.6) peut s'exprimer grâce aux fonctions de Green :

$$|\psi_\epsilon\rangle = |\mathbf{k}_0\rangle + \frac{|S_\psi\rangle \otimes |\delta_\epsilon\rangle}{E + i0^+ - \hat{H}}, \quad (1.6.7)$$

où le ket $|\mathbf{k}_0\rangle$ est une fonction propre du Hamiltonien sans interaction \hat{H} à énergie E et où la prescription habituelle de la théorie de la diffusion $i0^+$ permet de sélectionner les ondes diffusées sortantes. Dans le référentiel du centre de masse, où la suite des calculs va être effectuée, $|S_\psi\rangle$ est un scalaire S qui dépend de l'énergie. On utilise la relation de fermeture sur les impulsions de la particule relative :

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| = \mathbb{1}, \quad (1.6.8)$$

et en se rappelant que le Hamiltonien \hat{H} est diagonal dans la base des vecteurs $\{|\mathbf{k}\rangle\}$, on obtient la solution de l'équation (1.6.6) pour une énergie positive $E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu}$:

$$\langle \mathbf{r} | \psi_\epsilon \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_0 \rangle + \frac{2\mu S}{\hbar^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\exp\left(-\frac{k^2\epsilon^2}{4}\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k_0^2 - k^2 + i0^+}, \quad (1.6.9)$$

ce qui peut également s'écrire en projetant cette équation sur un bra $\langle \delta_\epsilon |$:

$$\langle \delta_\epsilon | \psi_\epsilon \rangle = \langle \delta_\epsilon | \mathbf{k}_0 \rangle + \frac{2\mu S}{\hbar^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\exp\left(-\frac{k^2\epsilon^2}{2}\right)}{k_0^2 - k^2 + i0^+}. \quad (1.6.10)$$

Ces deux intégrales peuvent se calculer pour des énergies négatives $E = \frac{-\hbar^2 q_0^2}{2\mu}$ avec $q_0 > 0$ où la prescription $i0^+$ n'a plus à être considérée. Pour des énergies positives, le résultat se trouve alors par prolongement analytique en remplaçant q_0 par $-ik_0$. Pour

9. Au sens où leur intégrale sur l'espace est l'unité.

10. Ces fonctions seront également utilisées pour les mêmes raisons de simplicité de calcul pour modéliser les formes de l'interaction directe et du couplage de Feshbach.

que $\langle \mathbf{r} | \psi_\epsilon \rangle$ ait la forme de l'équation (1.2.2) attendue pour une diffusion en onde s quand $\epsilon \rightarrow 0$, il faut et il suffit que :

$$S = \frac{-4\pi\hbar^2}{2\mu} f_s(k_0). \quad (1.6.11)$$

La diffusion en onde s [voir les équations (1.2.2) et (1.2.3) où $f_p = 0$] peut alors être retrouvée exactement en imposant la condition de contact :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} B_\epsilon \langle \delta_\epsilon | \psi_\epsilon \rangle = 0, \quad (1.6.12)$$

où B_ϵ est appelé l'opérateur frontière¹¹. Pour le modèle de portée effective en onde s , cet opérateur est [8] :

$$B_\epsilon = \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{a} + \partial_\epsilon + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{r_e}{4} \partial_\epsilon^2 \right] \epsilon. \quad (1.6.13)$$

11. *Boundary* en anglais.

Chapitre 2

Le modèle à deux voies

Les modèles à deux voies sont des cas particuliers des modèles multi-voies où l'on n'en considère seulement deux. Dans cette situation, on ne peut décrire microscopiquement le voisinage que d'une seule résonance de Feshbach, ce qui est suffisant pour traiter des propriétés de basse énergie pour des systèmes à petit nombre de corps.

Ces modèles possèdent de nombreux avantages par rapport aux modèles à une seule voie. Tout d'abord, ils découlent d'un Hamiltonien, ce qui n'est pas toujours le cas des modèles de contact à une voie. De plus, ils proposent une paramétrisation fine des résonances. En particulier, les états d'Efimov du problème à trois corps bosonique au voisinage de l'unitarité sont bien décrits et il n'est pas nécessaire de rajouter au modèle un paramètre à trois corps supplémentaire [65, 66]. Enfin, ces modèles prennent en compte explicitement la présence de molécules de Feshbach, qui peuvent être mesurées expérimentalement [67, 68].

2.1 Présentation du modèle à deux voies

Généralités sur les modèles à deux voies. Les modèles à deux voies comprennent une voie ouverte et une voie moléculaire fermée qui sont schématisées sur la Fig. 2.1. Dans la voie ouverte, deux atomes peuvent s'éloigner à l'infini l'un de l'autre. Dans la voie fermée, les deux atomes forment un état moléculaire. Le mécanisme de Feshbach est décrit par l'ajout d'un couplage cohérent entre ces deux voies. Ces modèles ont été introduits dans le contexte des atomes froids en 1995 pour étudier les collisions entre atomes de ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$ et ${}^{23}\text{Na}$ [69] et la transition BEC-BCS en 2001 [70].

Modèle utilisé dans ce manuscrit. Dans le modèle à deux voies utilisé ici, nous ajoutons à ce couplage une interaction directe séparable entre deux atomes de la voie ouverte, modélisant les collisions hors résonance de Feshbach. Chacune de ces deux interactions comprend une longueur caractéristique qui est de l'ordre du rayon de van der Waals. Pour des raisons de simplicité, ces deux longueurs, ainsi que les fonctions de coupure associées, sont supposés être les mêmes. En pratique, cette approximation donne de très bons résultats [65, 66]. Cette longueur, notée ϵ , permet donc de prendre en compte la taille caractéristique de l'interaction. Enfin, le moment magnétique d'une molécule dans la voie fermée est différente de celle d'une paire d'atomes dans la voie

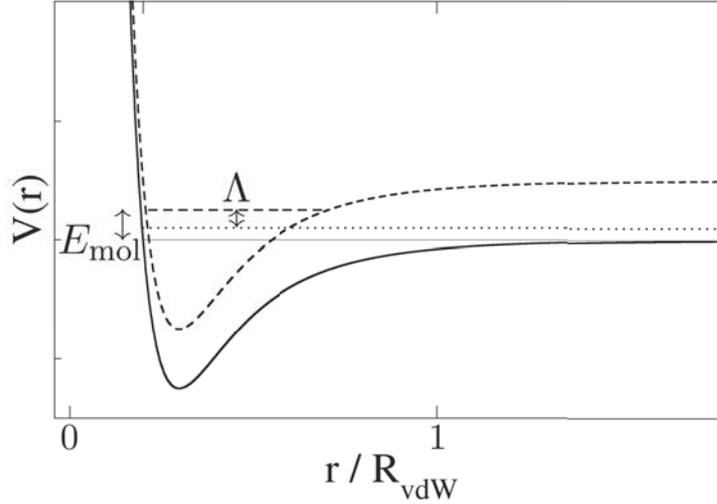


Fig. 2.1 Illustration des deux potentiels physiques du modèle à deux voies, ainsi que de l'état lié d'énergie E_{mol} et de son couplage Λ avec la voie ouverte. Les pointillés représentent l'énergie d'une paire atomique dans la voie ouverte.

ouverte et l'ajout d'un champ magnétique extérieur va, par effet Zeeman, déplacer les niveaux d'énergie de la voie ouverte par rapport à ceux de la voie fermée. C'est grâce à cet ajustement que, pour une valeur donnée de champ magnétique, la résonance de Feshbach pourra avoir lieu.

Ce modèle ne considère que des interactions possibles à deux corps, même si cela n'exclut en rien la possibilité d'avoir trois (ou plus de trois) particules très proches les unes des autres et qui interagissent toutes deux à deux.

2.2 Pertinence de ce modèle

Le modèle à deux voies utilisé dans ce manuscrit a donné des prédictions quantitatives sur des sujets très variés : nombre de molécules de la voie fermée lors de la transition BEC-BCS [67, 68], problème à 3 corps bosoniques [65], équation intégrale pour le problème à 4 corps [71], étude détaillée des dimères et du taux de recombinaison à trois corps [66]. De plus, les équations apparaissant dans ces problèmes sont du même ordre de complexité que celles des modèles à une voie de portée nulle.

2.3 Hamiltonien du modèle à deux voies

Dans tout ce manuscrit, le mouvement du centre de masse et celui de la particule fictive sont séparables. De plus, les atomes de masse réduite $\mu = m/2$ et les molécules de masse $M = 2m$ sont considérés comme étant ponctuels et sans structure interne. Le Hamiltonien \hat{H}_{tot} du modèle à deux voies est schématisé par la Fig. 2.2 et comprend

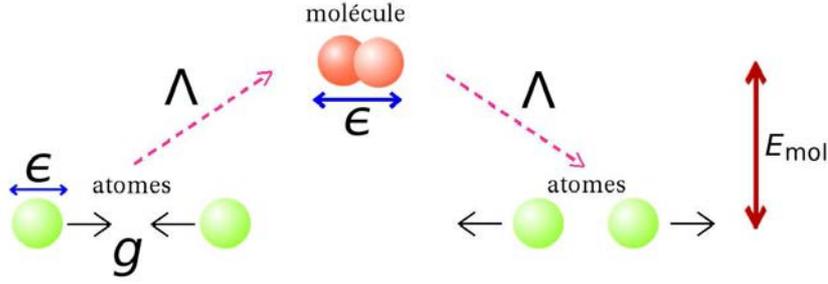


Fig. 2.2 Représentation schématique du modèle à deux voies. Dans ce modèle, les particules sont ponctuelles et la longueur ϵ correspond à la taille caractéristique de l'interaction directe ou du couplage de Feshbach.

quatre termes :

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_0^{\text{a}} + \hat{H}_0^{\text{m}} + \hat{V}_{\text{d}} + (\hat{V}_{\text{c}} + \hat{V}_{\text{c}}^{\dagger}). \quad (2.3.1)$$

Hamiltoniens sans interactions. Les deux premiers termes, \hat{H}_0^{a} et \hat{H}_0^{m} , correspondent au mouvement sans interaction des atomes et de la molécule, c'est-à-dire qu'ils incluent l'énergie cinétique ainsi que l'énergie interne de l'état moléculaire pour \hat{H}_0^{m} . De plus, dans les chapitres 3 et 5, ces deux Hamiltoniens pourront également inclure un potentiel extérieur séparable. Dans tous les cas, on appelle (α_{c}) [resp. (α_{r})] les nombres quantiques associés au centre de masse (resp. à la particule relative) des états propres de \hat{H}_0^{a} . Ceux de \hat{H}_0^{m} sont nommés (α_{m}) . Les énergies propres associées sont :

$$\hat{H}_0^{\text{a}}|\alpha_{\text{r}}, \alpha_{\text{c}}\rangle = [\mathcal{E}_{\text{r}}(\alpha_{\text{r}}) + \mathcal{E}_{\text{c}}(\alpha_{\text{c}})] |\alpha_{\text{r}}, \alpha_{\text{c}}\rangle \quad (2.3.2)$$

$$\hat{H}_0^{\text{m}}|\alpha_{\text{m}}\rangle = [\mathcal{E}_{\text{c}}(\alpha_{\text{m}}) + E_{\text{mol}}] |\alpha_{\text{m}}\rangle. \quad (2.3.3)$$

Exemple : le milieu homogène. Dans le milieu homogène, les Hamiltoniens sans interactions sont :

$$\hat{H}_0^{\text{a}} = \frac{\hat{p}_{\text{a}}^2}{2\mu} + \frac{\hat{P}_{\text{a}}^2}{2M} \quad ; \quad \hat{H}_0^{\text{m}} = \frac{\hat{P}_{\text{m}}^2}{2M}, \quad (2.3.4)$$

où les opérateurs impulsion \hat{p}_{a} , \hat{P}_{a} et \hat{P}_{m} concernent respectivement la particule relative, le centre de masse de la paire et la molécule. Les nombres quantiques sont alors :

$$\alpha_{\text{r}} = \mathbf{k} \quad ; \quad \alpha_{\text{c}} = \mathbf{K} \quad ; \quad \alpha_{\text{m}} = \mathbf{K}, \quad (2.3.5)$$

où \mathbf{k} est l'impulsion de la particule relative et où \mathbf{K} est celle du centre de masse, et les énergies associées sont :

$$\mathcal{E}_{\text{r}}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad ; \quad \mathcal{E}_{\text{c}}(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2 K^2}{2M}. \quad (2.3.6)$$

Énergie moléculaire. L'énergie moléculaire¹ E_{mol} , ajustable grâce à l'effet Zeeman, est choisie de façon à ce que le zéro d'énergie corresponde au seuil d'apparition du continuum d'énergie dans la voie ouverte. Au voisinage de la résonance de Feshbach magnétique, on considère, dans une bonne approximation, que l'énergie moléculaire est une fonction affine du champ magnétique extérieur B :

$$\delta\mathcal{M} = \left(\frac{\partial E_{\text{mol}}}{\partial B} \right)_{B_0}. \quad (2.3.7)$$

Dans l'équation (2.3.7), la différence de moment magnétique entre la voie ouverte et la voie fermée est notée $\delta\mathcal{M}$ et on note B_0 la valeur du champ magnétique B pour laquelle il y a une résonance de Feshbach.

Interaction directe. Dans ce modèle, l'interaction directe entre deux atomes de la voie ouverte est modélisée par un potentiel séparable qui n'agit de façon non triviale que dans le sous-espace de la partie relative d'une paire d'atomes. En appelant $\mathbb{1}_{\text{cdm}}$ l'identité dans le sous-espace du centre de masse, l'interaction directe est² :

$$\hat{V}_{\text{d}} = g|\delta_\epsilon\rangle\langle\delta_\epsilon| \otimes \mathbb{1}_{\text{cdm}}, \quad (2.3.8)$$

où g est la constante de l'interaction et où le ket $|\delta_\epsilon\rangle$ est une fonction de coupure gaussienne qui permet de prendre en compte la portée non nulle ϵ de l'interaction. Ce terme est essentiel pour décrire la physique hors de la résonance de Feshbach et en particulier définir la longueur de diffusion hors de la résonance a_{bg} . En représentation de configuration et en impulsion, on a³ :

$$\langle\mathbf{r}|\delta_\epsilon\rangle = \frac{1}{\epsilon^3\pi^{3/2}} \exp(-r^2/\epsilon^2) \quad ; \quad \langle\mathbf{k}|\delta_\epsilon\rangle = \chi_\epsilon(k) = \exp(-k^2\epsilon^2/4). \quad (2.3.9)$$

Il est aisé de vérifier que $\langle\mathbf{r}|\delta_\epsilon\rangle$ converge simplement vers une distribution de Dirac lorsque $\epsilon \rightarrow 0$. Le passage entre les deux représentations s'effectue en utilisant la convention suivante pour l'onde plane :

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.3.10)$$

Cette interaction directe permet une diffusion en onde s . La limite de portée nulle correspond à la limite où le support de l'interaction est négligeable, *i.e.* $\epsilon \rightarrow 0$. Enfin, le choix d'une fonction gaussienne dans la forme de $|\delta_\epsilon\rangle$ simplifie les calculs.

Couplage de Feshbach. Le dernier terme du Hamiltonien du modèle à deux voies de l'équation (2.3.1) est un couplage cohérent entre les deux voies. Il permet de modéliser le mécanisme de la résonance de Feshbach : deux atomes de la voie ouverte peuvent former une molécule, et inversement, une molécule peut se désintégrer en une paire

1. Par cohérence de notation avec les articles associés, l'énergie moléculaire sera notée E_{mol} dans les chapitres 2 et 3, E_{η}^{m} dans le chapitre 4 et E_{m} dans le chapitre 5.

2. Tout comme l'énergie moléculaire, l'interaction directe sera notée différemment selon les chapitres : \hat{V}_{d} dans les chapitres 2 et 3, et $\hat{V}_{\text{B/F}}$ dans le chapitre 5.

3. Ce ket est exactement le même que celui présenté dans l'équation (1.6.4) pour définir la condition de contact en ϵ .

d'atomes. Un état moléculaire dans la voie fermée $|\Psi^m\rangle$ et une paire d'atomes dans la voie ouverte $|\Psi^a\rangle$ sont ainsi couplés⁴ :

$$\langle \Psi^a | \hat{V}_c | \Psi^m \rangle = \Lambda \langle \Psi^a | (|\delta_\epsilon\rangle \otimes |\Psi^m\rangle). \quad (2.3.11)$$

Le paramètre Λ est choisi réel et gouverne la force du couplage. Dans l'équation (2.3.11), le ket $|\delta_\epsilon\rangle$ agit sur la partie relative de la fonction d'onde d'une paire d'atomes $|\Psi^a\rangle$ alors que la fonction d'onde moléculaire $|\Psi^m\rangle$ agit sur les nombres quantiques du centre de masse de la paire atomique.

La longueur ϵ du couplage de Feshbach est choisie comme étant la même que pour l'interaction directe. En effet, dans ces deux cas, ϵ est typiquement de l'ordre de grandeur du rayon de van der Waals. Or, choisir la même valeur simplifie grandement les calculs sans altérer l'adéquation aux expériences au niveau quantitatif [65, 66].

Séparabilité. Ces différentes interactions n'agissent pas sur les nombres quantiques du centre de masse et on peut en déduire, grâce à la séparabilité du modèle, que les nombres quantiques du centre de masse se conservent lors d'un processus de diffusion.

2.4 Lien entre les paramètres du modèle à deux voies et les paramètres expérimentaux

Le modèle à deux voies prédit que la longueur de diffusion varie avec le champ magnétique suivant la loi habituelle des résonances de Feshbach⁵ :

$$a = a_{\text{bg}} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (2.4.1)$$

Une résonance de Feshbach a lieu lorsque le champ magnétique B tend vers B_0 , alors qu'une résonance de forme a lieu si la longueur de diffusion hors résonance est grande par rapport au rayon de van der Waals ($a_{\text{bg}} \gg R_{\text{vdW}}$). Cette dernière a lieu s'il existe, dans la voie ouverte, un état lié d'énergie très proche du seuil du continuum. Elle est présente par exemple pour la résonance à $-11,7$ G du ^{133}Cs où $a_{\text{bg}} = 1720a_0$ (ce qui est grand par rapport à $R_{\text{vdW}} = 100a_0$) [2].

La largeur magnétique de la résonance ΔB donne naissance à une longueur caractéristique de la résonance de Feshbach [6] :

$$R^* = \frac{\hbar^2}{2\mu a_{\text{bg}} \delta \mathcal{M} \Delta B}, \quad (2.4.2)$$

qui est toujours positive. Cette longueur permet de définir deux régimes extrêmes. Une résonance est large⁶ si R^* est petite devant le rayon de van der Waals. En revanche, une résonance est étroite si R^* est grande. Cette nouvelle longueur est au cœur de cette

4. Pour les mêmes raisons que pour l'énergie moléculaire, le couplage de Feshbach sera noté \hat{V}_c dans les chapitres 2 et 3, et $\hat{W}_{\text{B/F}}$ dans le chapitre 5.

5. Les liens entre a_{bg} , ΔB et les paramètres du modèle à deux voies se trouvent par exemple dans les références [39, 66].

6. Dans le sens où généralement, cela implique que ΔB soit grand.

thèse. En effet, dans le cas d'une résonance étroite, elle ajoute au système une nouvelle longueur caractéristique (ou, de façon équivalente, une nouvelle échelle d'énergie) qui influe en profondeur sur les résultats du problème à petit nombre de corps [6, 7, 8].

Ces longueurs permettent également de définir une longueur de diffusion effective dépendant de l'énergie :

$$a_{\text{eff}}(E) = [\chi_\epsilon(k)]^2 \left[\frac{1}{a} + \frac{R^*(1 - \frac{a_{\text{bg}}}{a})^2 k^2}{R^* a_{\text{bg}} (1 - \frac{a_{\text{bg}}}{a}) k^2 + 1} \right]^{-1} ; \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}, \quad (2.4.3)$$

au sens où, dans la limite de portée nulle ($\epsilon \rightarrow 0$), l'amplitude de diffusion s'écrit :

$$f_s(k) = \frac{-1}{\frac{1}{a_{\text{eff}}(E)} + ik}. \quad (2.4.4)$$

Cette longueur est également définie pour des énergies négatives avec le prolongement analytique $ik = -q$. L'énergie moléculaire E_{mol} varie linéairement avec le champ magnétique mais ne s'annule pas à la résonance :

$$E_{\text{mol}} = \delta\mathcal{M}(B - B_0) - \frac{\delta\mathcal{M}\Delta B}{1 - \frac{\epsilon}{a_{\text{bg}}}\sqrt{\frac{\pi}{2}}}. \quad (2.4.5)$$

En effet, l'énergie moléculaire correspond à l'énergie de la molécule sans couplage de Feshbach avec la voie ouverte. La résonance a lieu, quant à elle, lorsque l'énergie de l'état propre résultant du couplage entre l'état moléculaire et la voie fermée atteint le seuil d'apparition du continuum d'énergie du Hamiltonien total (donc avec couplage).

2.5 Contribution de la voie moléculaire dans le produit scalaire

Le mécanisme de Feshbach est inclus dans l'existence d'une voie moléculaire et dans son couplage avec la voie ouverte. L'énergie moléculaire est reliée aux différentes longueurs du système :

$$E_{\text{mol}} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^*} \frac{a - \epsilon\sqrt{\frac{\pi}{2}}}{(a - a_{\text{bg}})(\epsilon\sqrt{\frac{\pi}{2}} - a_{\text{bg}})}. \quad (2.5.1)$$

où a est la longueur de diffusion et où ϵ est toujours de l'ordre de grandeur du rayon de van der Waals. Pour un modèle où $a_{\text{bg}} = 0$ et au voisinage d'une résonance de diffusion ($a \gg \epsilon$) :

$$E_{\text{mol}} = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\mu}} \frac{1}{\epsilon R^*}. \quad (2.5.2)$$

Dans le cas d'une résonance large, R^* est petite, voire très petite, devant ϵ , et l'énergie moléculaire est une échelle d'énergie très grande. Il est alors possible de proposer des modèles à une voie qui décrivent très bien la physique de basse énergie par rapport à l'énergie de van der Waals. Au contraire, pour des résonances étroites, R^* est grande devant ϵ , et l'énergie moléculaire est une échelle d'énergie intermédiaire, qui doit être prise en compte dans le modèle. Ceci peut être fait soit en utilisant explicitement un

modèle à deux voies, soit en ajoutant la contribution de la voie moléculaire dans un modèle à une voie, par exemple en utilisant un produit scalaire modifié [72].

L'équation de Schrödinger du modèle à deux voies est :

$$(E - \hat{H}_0^a)|\Psi^a\rangle = \Lambda|\delta_\epsilon\rangle \otimes |\Psi^m\rangle + g|\delta_\epsilon\rangle \otimes \langle\delta_\epsilon|\Psi^a\rangle \quad (2.5.3)$$

$$(E - \hat{H}_0^m)|\Psi^m\rangle = \Lambda\langle\delta_\epsilon|\Psi^a\rangle, \quad (2.5.4)$$

ce qui peut s'écrire sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_0^a + \hat{V}_d & \hat{V}_c \\ \hat{V}_c^\dagger & \hat{H}_0^m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi^a\rangle \\ |\Psi^m\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\Psi^a\rangle \\ |\Psi^m\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.5.5)$$

Comme il a été vu précédemment, le problème est séparable au sens où les variables du centre de masse et celles de la particule relative se découplent. On peut alors écrire les états propres et leurs énergies associées sous la forme :

$$|\Psi^m\rangle \propto |\alpha_c\rangle \quad ; \quad |\Psi^a\rangle = |\Psi^{\text{rel}}\rangle \otimes |\alpha_c\rangle \quad ; \quad E = \mathcal{E}_c(\alpha_c) + E_\Psi^{\text{rel}}, \quad (2.5.6)$$

où les nombres quantiques compris dans α_c correspondent aux nombres quantiques du centre de masse sans interaction. L'équation (2.5.4) peut être inversée et on trouve :

$$|\Psi^m\rangle = |\alpha_c\rangle \frac{\Lambda\langle\delta_\epsilon|\Psi^{\text{rel}}\rangle}{E_\Psi^{\text{rel}} - E_{\text{mol}}}. \quad (2.5.7)$$

La présence de l'état moléculaire interdit à deux états propres de la voie ouverte possédant les mêmes nombres quantiques de centre de masse et notés :

$$|\Psi^{\text{rel}}\rangle \otimes |\alpha_c\rangle \quad \text{et} \quad |\Phi^{\text{rel}}\rangle \otimes |\alpha_c\rangle \quad (2.5.8)$$

d'énergies relatives E_Ψ^{rel} et E_Φ^{rel} , d'être orthogonaux entre eux. En effet, en appliquant la projection de l'équation de Schrödinger (2.5.3) pour ces deux états, on trouve :

$$\left[E_\Psi^{\text{rel}} + \mathcal{E}_c(\alpha_c) - \hat{H}_0^a \right] |\Psi^{\text{rel}}\rangle \otimes |\alpha_c\rangle = \frac{\Lambda^2\langle\delta_\epsilon|\Psi^{\text{rel}}\rangle}{E_\Psi^{\text{rel}} - E_{\text{mol}}} |\delta_\epsilon\rangle \otimes |\alpha_c\rangle + g\langle\delta_\epsilon|\Psi^{\text{rel}}\rangle |\delta_\epsilon\rangle \otimes |\alpha_c\rangle \quad (2.5.9)$$

$$\left[E_\Phi^{\text{rel}} + \mathcal{E}_c(\alpha_c) - \hat{H}_0^a \right] |\Phi^{\text{rel}}\rangle \otimes |\alpha_c\rangle = \frac{\Lambda^2\langle\delta_\epsilon|\Phi^{\text{rel}}\rangle}{E_\Phi^{\text{rel}} - E_{\text{mol}}} |\delta_\epsilon\rangle \otimes |\alpha_c\rangle + g\langle\delta_\epsilon|\Phi^{\text{rel}}\rangle |\delta_\epsilon\rangle \otimes |\alpha_c\rangle. \quad (2.5.10)$$

En multipliant l'équation (2.5.9) par $\langle\Phi^{\text{rel}}|$ et l'équation (2.5.10) par $\langle\Psi^{\text{rel}}|$, et en soustrayant ces deux équations entre elles, on obtient la relation d'orthogonalité suivante pour la voie ouverte :

$$\langle\Phi^{\text{rel}}| \left[\mathbb{1} + \frac{\Lambda^2|\delta_\epsilon\rangle\langle\delta_\epsilon|}{(E_\Phi^{\text{rel}} - E_{\text{mol}})(E_\Psi^{\text{rel}} - E_{\text{mol}})} \right] |\Psi^{\text{rel}}\rangle = 0. \quad (2.5.11)$$

Le terme $\mathbb{1}$ dans cette relation est habituel, il provient de la contribution de la voie ouverte. Sans couplage avec la voie fermée, *i.e.* dans la limite $\Lambda = 0$, les deux états

$|\Psi^{\text{rel}}\rangle$ et $|\Phi^{\text{rel}}\rangle$ seraient orthogonaux. Ici ce n'est pas le cas, justement à cause de la contribution de la voie moléculaire, qui est le terme de droite entre les crochets de l'équation (2.5.11). Cette contribution doit également être prise en considération lorsque l'on cherche à normaliser les états propres. En effet, si la fonction d'onde est normalisée, donc si :

$$\langle \Psi^{\text{a}} | \Psi^{\text{a}} \rangle + \langle \Psi^{\text{m}} | \Psi^{\text{m}} \rangle = 1, \quad (2.5.12)$$

alors, en utilisant l'équation (2.5.7), on trouve que :

$$\langle \Psi^{\text{rel}} | \left[1 + \frac{\Lambda^2 |\delta_\epsilon\rangle \langle \delta_\epsilon|}{(E_\Psi^{\text{rel}} - E_{\text{mol}})^2} \right] | \Psi^{\text{rel}} \rangle = 1. \quad (2.5.13)$$

Encore une fois, on retrouve la contribution de l'état moléculaire, qui est le terme de droite entre les crochets.

Limite de portée nulle sans interaction directe. Dans la limite de portée nulle ($\epsilon \rightarrow 0$) sans interaction directe ($g \rightarrow 0$), l'énergie moléculaire diverge [8]. On peut alors écrire l'équation de Schrödinger pour la particule relative comme :

$$(E_\Psi^{\text{rel}} - \hat{H}_0^{a,\text{rel}}) |\Psi^{\text{rel}}\rangle = \frac{-2\pi\hbar^2 A_\Psi}{\mu} |\delta_\epsilon\rangle, \quad (2.5.14)$$

où $\hat{H}_0^{a,\text{rel}}$ est la partie du Hamiltonien \hat{H}_0^a qui agit dans l'espace de la particule relative, et où l'on a défini :

$$A_\Psi = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{\Lambda^2}{E_{\text{mol}}} \langle \delta_\epsilon | \Psi^{\text{rel}} \rangle. \quad (2.5.15)$$

À partir de l'équation (2.5.11), on peut exprimer le produit scalaire entre deux fonctions d'onde relatives dans cette limite comme :

$$\langle \Phi^{\text{rel}} | \Psi^{\text{rel}} \rangle = -4\pi R^* A_\Psi A_\Phi^*. \quad (2.5.16)$$

On peut alors construire un produit scalaire modifié en soustrayant au produit scalaire canonique le membre de droite de l'équation (2.5.16) :

$$(\Phi^{\text{rel}} | \Psi^{\text{rel}})_0 = \langle \Phi^{\text{rel}} | \Psi^{\text{rel}} \rangle + 4\pi R^* A_\Psi A_\Phi^*, \quad (2.5.17)$$

qui permet de rendre les fonctions d'onde relatives de la voie ouverte orthogonales entre elles et de prendre implicitement en compte la présence de la voie moléculaire [72, 73]. On voit alors que pour une résonance étroite, le produit scalaire modifié n'est pas réduit au produit scalaire canonique et que pour cette problématique, le rôle de la voie fermée est primordial.

Chapitre 3

Collisions dans un guide d'onde

Dans ce chapitre, nous étudions la collision de deux particules interagissant *via* le modèle à deux voies et confinées dans un guide d'onde uni- ou bidimensionnel. Cette étude permet, en considérant des confinements intenses, de proposer des modèles d'interactions uni- ou bidimensionnels déduit du modèle à deux voies. En particulier, nous mettons en lumière un régime unidimensionnel où la portée effective unidimensionnelle joue un rôle prédominant.

3.1 Modèles purement uni- et bidimensionnels

Fonctions d'onde. Tout comme lors d'une interaction dans l'espace tridimensionnel, la fonction d'onde d'une particule relative après une collision uni- ou bidimensionnelle possède asymptotiquement une forme bien déterminée, due à l'unitarité du processus d'interaction (cf les références [42] pour le 1D, [46] §123 et §132 pour le 2D). Lorsque l'on se limite à une diffusion en onde s^1 pour un potentiel d'interaction de courte portée, on trouve :

$$\psi^{2D}(\boldsymbol{\rho}) \underset{|\boldsymbol{\rho}| \gg l_{2D}}{\simeq} \exp(i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}) + f^{2D}(k) \frac{i\pi}{2} H_0^{(1)}(k\rho); \quad f^{2D}(k) = \frac{1}{\ln\left(\frac{-ika_{2D}e^\gamma}{2}\right) + k^2 g_{2D}(k^2)}, \quad (3.1.1)$$

$$\psi^{1D}(z) \underset{|r| \gg l_{1D}}{\simeq} \exp(ikz) + f^{1D}(k) \exp(ik|z|); \quad f^{1D}(k) = \frac{-1}{1 + ikg_{1D}(k^2)}. \quad (3.1.2)$$

Dans ces formules, $\boldsymbol{\rho}$ (resp. z) représente le vecteur position de la particule relative dans le plan (resp. dans l'espace unidimensionnel) et $H_0^{(1)}$ est la fonction de Hankel d'ordre zéro. Les longueurs l_{1D} et l_{2D} représentent la portée caractéristique de l'interaction uni- ou bidimensionnelle². À partir des amplitudes de diffusion, on peut définir deux longueurs de diffusion, notées a_{2D} et a_{1D} . La longueur de diffusion bidimensionnelle a_{2D} est toujours positive et pour une diffusion unidimensionnelle, la longueur de diffusion

1. Dans l'espace unidimensionnel, on parle plutôt de secteur pair qui est l'équivalent de l'onde s .

2. Ces longueurs n'ont vraiment de sens physique que si le système uni- ou bidimensionnel est déduit d'un modèle tridimensionnel fortement confiné. Dans le cas d'un guide d'onde harmonique, ces longueurs sont de l'ordre de a_\perp .

est :

$$a_{1D} = g_{1D}(0). \quad (3.1.3)$$

Tout comme pour une collision tridimensionnelle, la diffusion en dimension réduite est appelée résonante lorsque la section efficace du processus de diffusion – c'est-à-dire le module au carré de l'amplitude de diffusion – est maximale. Ceci a lieu lorsque :

$$\left(a_{2D} \gg l_{2D} \quad \text{et} \quad k \sim \frac{2e^{-\gamma}}{a_{2D}} \right) \quad (2D) \quad ; \quad (a_{1D} \rightarrow 0) \quad (1D). \quad (3.1.4)$$

Les déphasages. Lors d'une collision binaire, loin du cœur de l'interaction, l'équation de Schrödinger de la particule relative s'écrit :

$$\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2\mu} |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (3.1.5)$$

Les états de diffusion sont la somme d'une onde incidente et d'une onde diffusée. Dans les trois dimensions considérées ici, l'onde incidente est :

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3D) \quad ; \quad e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} \quad (2D) \quad ; \quad e^{ikz} \quad (1D). \quad (3.1.6)$$

En représentation de configuration, les fonctions d'onde des états de diffusion en onde s peuvent s'écrire à longue distance dans les trois dimensions sous la forme [cf les références [46] § 123 (3D et 2D) et [42] (1D)] :

$$\psi \sim \begin{cases} \frac{e^{i\delta(E)}}{kr} \sin [kr + \delta(E)] & (3D) \\ \sqrt{\frac{2}{\pi k\rho}} e^{i\delta(E)} \sin \left[k\rho + \delta(E) + \frac{\pi}{4} \right] & (2D) \\ e^{i\delta(E)} \sin \left[k|z| + \delta(E) + \frac{\pi}{2} \right] & (1D). \end{cases} \quad (3.1.7)$$

Dans la forme des fonctions d'onde asymptotiques (3.1.7), l'information sur le potentiel d'interaction est contenue dans les déphasages en onde s notés $\delta(E)$ et qui dépendent de l'énergie (et donc du vecteur d'onde) du processus de diffusion. Pour une diffusion unidimensionnelle, la définition du déphasage pour le secteur pair de l'équation (3.1.7) diffère par un déphasage de $\pi/2$ par rapport à celle de la référence [16].

Modèle de Wigner-Bethe-Peierls. Le modèle de Wigner-Bethe-Peierls est défini par le cas où le dénominateur des amplitudes de diffusion des équations (3.1.1) et (3.1.2) ne dépend que de la longueur de diffusion :

$$g_{2D}(k^2) = 0 \quad (2D) \quad ; \quad g_{1D}(k^2) = a_{1D} \quad (1D). \quad (3.1.8)$$

La dénomination « Wigner-Bethe-Peierls » s'applique habituellement plutôt à un système tridimensionnel. Par analogie, nous utilisons ici cette dénomination également pour des systèmes uni- et bidimensionnel. Pour un système unidimensionnel, nous parlerons également de modèle de Lieb-Liniger³ en référence à la solution du problème à

3. On parle aussi parfois de modèle de Lieb-Liniger-McGuire, car ce dernier a étudié le cas où $a_{1D} > 0$ [74].

N bosons pour une longueur de diffusion négative ($a_{1D} < 0$) et du problème à deux corps pour une longueur de diffusion positive [20].

Modèle de portée effective. Lorsque l'on développe les fonctions g_{2D} et g_{1D} à l'ordre suivant, on définit le modèle de portée effective qui prend en compte la longueur de diffusion, mais aussi la portée effective que l'on note R_{2D} et R_{1D} :

$$g_{2D}(k^2) = -R_{2D}a_{2D} \quad (2D) \quad ; \quad g_{1D}(k^2) = a_{1D} - R_{1D}^3 k^2 \quad (1D). \quad (3.1.9)$$

Dimère du modèle de Wigner-Bethe-Peierls. Le modèle de Wigner-Bethe-Peierls prédit l'existence d'un état lié si la longueur de diffusion a_{2D} ou a_{1D} est positive⁴ avec l'énergie :

$$\frac{-2\hbar^2 e^{-2\gamma}}{\mu(a_{2D})^2} \quad (2D) \quad ; \quad \frac{-\hbar^2}{2\mu(a_{1D})^2} \quad (1D). \quad (3.1.10)$$

Dimère du modèle de portée effective. Dans le cas où la portée effective (R_{2D} ou R_{1D}) est positive, le modèle de portée effective prédit l'existence d'un unique dimère d'énergie :

$$\frac{-\hbar^2 \kappa^2}{2\mu}, \quad (3.1.11)$$

où κ est l'unique solution positive de l'équation :

$$\ln\left(\frac{\kappa a_{2D} e^\gamma}{2}\right) + a_{2D} R_{2D} \kappa^2 = 0 \quad (2D) \quad ; \quad 1 - a_{1D} \kappa - R_{1D}^3 \kappa^3 = 0 \quad (1D). \quad (3.1.12)$$

3.2 Limite des modèles purement unidimensionnels

3.2.1 Quelques expériences en dimension réduite

Les gaz d'atomes froids sont des systèmes tridimensionnels. Pour atteindre des régimes dégénérés en dimensions réduites, il est donc nécessaire d'utiliser un piège fortement anisotrope. Il existe de nombreuses méthodes différentes pour réaliser de tels confinements et plusieurs groupes travaillent sur ces problématiques à travers le monde. Nous présentons ici quelques expériences importantes pour les gaz d'atomes froids en dimensions réduites et nous donnons en particulier quelques caractéristiques sur les confinements utilisés pour atteindre ces régimes.

L'équipe de Tilman Esslinger à l'ETH Zürich s'est intéressé depuis les années 2000 aux gaz d'atomes froids en dimension réduite [75, 76]. Dans ces deux expériences, un condensat de Bose-Einstein de rubidium d'environ 5×10^5 atomes est tout d'abord créé puis est ensuite réparti adiabatiquement dans environ 3000 guides d'onde unidimensionnels indépendants. Ces guides d'onde sont obtenus à partir de deux lasers perpendiculaires qui se réfléchissent dans des miroirs afin d'être en régime stationnaires (voir la figure 3.1). Dans cette configuration, la pulsation transverse de chaque guide d'onde est de $\omega_\perp = 2\pi \times 18.5\text{kHz}$ pour une pulsation longitudinale de l'ordre de $2\pi \times 100\text{Hz}$. Cette méthode populaire a également été utilisée par exemple dans la

4. Ce qui est toujours le cas pour a_{2D} .

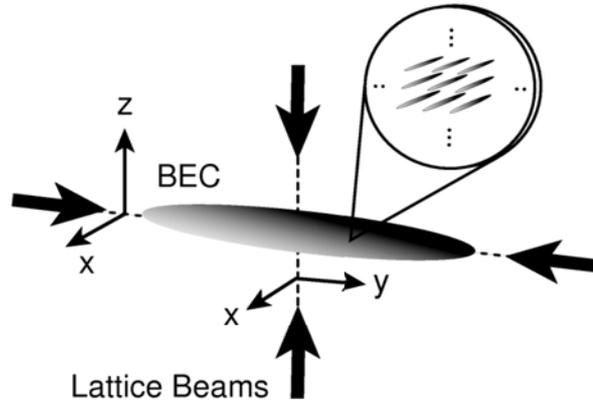


Fig. 3.1 Schéma tiré de la référence [75] représentant un ensemble d'environ 3000 guides d'onde engendrés par deux lasers stationnaires.

première réalisation d'un gaz de Tonks-Girardeau [11] ou pour étudier les excitations d'un gaz unidimensionnel bosonique [77, 78, 79]. Dans toutes ces expériences, les caractéristiques des guides d'onde sont proches de celles des expériences de l'ETH. Par exemple à Innsbruck [79], $1,1 \times 10^5$ atomes de césium sont répartis dans environ 4000 guides d'onde de pulsations transverses $\omega_{\perp} = 2\pi \times 14,5\text{kHz}$.

Les recherches de l'équipe de Jean Dalibard au Laboratoire Kastler Brossel, qui concernent notamment les condensat de Bose-Einstein 2D [80], ont permis d'observer la transition Berezinskii-Kosterlitz-Thouless dans un gaz d'atomes froids [81]. Récemment l'équation d'état d'un gaz de Bose 2D a pu être étudiée dans ces expériences [82].

Le piège à ondes évanescentes a permis de réaliser le premier condensat de Bose-Einstein bidimensionnel à Innsbruck [83, 84, 85]. Il a aussi été utilisé par le groupe de Vincent Lorent dans les expériences du Laboratoire de Physique des Lasers [86]. Ce piégeage est composé d'un prisme diélectrique de fort indice optique ($n = 1,86$) sur lequel se reflètent deux lasers désaccordés par rapport à la résonance atomique⁵. Le laser noté bleu (resp. rouge) possède une fréquence supérieure (resp. inférieure) à celle de la résonance. La réflexion de ces lasers au niveau du prisme créent des ondes évanescentes (cf figure 3.2) dans lesquelles sont piégés les atomes de rubidium. L'angle d'incidence de chacun de ces deux faisceaux est choisie de façon à ce que la zone éclairée par le laser « bleu » soit plus grande que son homologue « rouge » afin que les atomes soient confinés dans un espace restreint. Les ondes évanescentes ayant une décroissance exponentielle, le confinement dans l'axe z est beaucoup plus intense que dans le plan parallèle au prisme, ce qui permet de s'approcher d'un régime bidimensionnel. En plus de ce potentiel dipolaire, les atomes ressentent également une interaction avec la paroi proche du prisme, ainsi que l'effet de la gravité. Le potentiel de confinement résultant possède alors une forme complexe. Cependant, pour avoir un ordre d'idée, au voisinage de son minimum, l'approximation harmonique donne pour le piège les pulsations $\omega_x = 2\pi \times 45\text{Hz}$, $\omega_y = 2\pi \times 60\text{Hz}$, $\omega_z = 2\pi \times 24\text{KHz}$, ce qui confirme la très

5. Ce dispositif peut également servir de miroir à atomes [87] s'il n'existe que l'onde évanescente « bleue ».

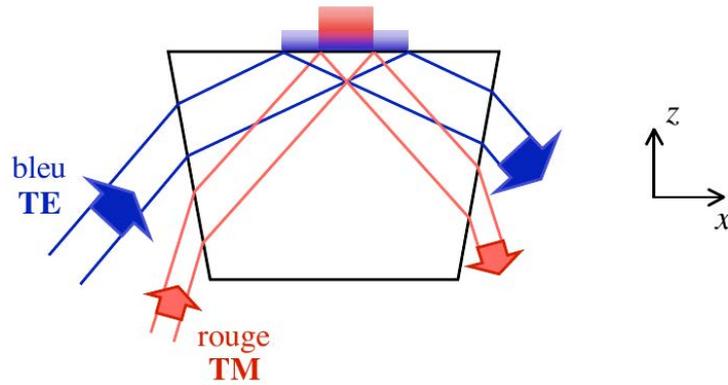


Fig. 3.2 Schéma du piège à ondes évanescentes tiré de la référence [86]. Au niveau de la réflexion sur le prisme de grand indice optique, un laser bleu et un laser rouge créent une onde évanescente qui crée un potentiel très confinant dans la direction z .

grande anisotropie de ce piège.

Dans toutes ces expériences, la fréquence transverse du piège est beaucoup plus grande que la fréquence longitudinale. Ces pièges très anisotropes peuvent donc être considérés comme des guides d'onde. De plus, ils vérifient la condition $k_B T \lesssim \hbar \omega_{\perp}$: le gaz est donc dans un régime de dimension réduite. Enfin, le piège peut être approximé par un guide d'onde harmonique si la forme du potentiel créé par le piège est proche de celle d'un oscillateur harmonique pour des échelles d'énergie de l'ordre de quelques $\hbar \omega_{\perp}$.

3.2.2 Longueurs de diffusion dans un guide d'onde

Pour s'approcher de systèmes de dimension réduite, il faut confiner, grâce à un guide d'onde, un gaz tridimensionnel selon une ou deux directions, ce qui donne soit une *crêpe*, soit un *cigare*. Si le confinement est suffisamment intense et la température suffisamment basse, le gaz peut se comporter comme un gaz bidimensionnel ou unidimensionnel. Quantitativement, cette approximation est valide si les particules qui composent le gaz ne peuplent que l'état fondamental du guide d'onde lorsqu'elles sont éloignées les unes des autres. Cependant, lors de la collision entre deux atomes, celles-ci peuvent peupler des états excités du guide d'onde (voir schéma de la Fig. 3.3).

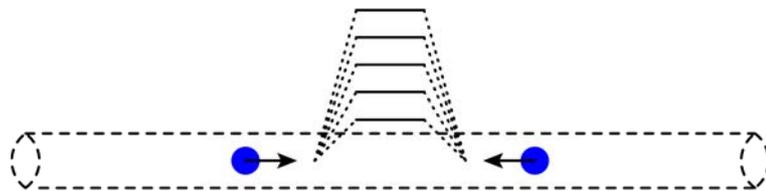


Fig. 3.3 Schéma représentant deux atomes confinés dans un guide d'onde unidimensionnel, mais dont la collision permet de peupler à courte distance les différents niveaux du guide d'onde.

Il est important de relier les paramètres de l'interaction tridimensionnelle avec ceux de la collision en dimension réduite. Les travaux pionniers – et toujours d'actualité – de ces réductions dimensionnelles ont été menés par Olshanii pour le 1D [16], Petrov *et al* pour le 2D [18, 19], dans le cadre d'un guide d'onde harmonique de pulsation ω_{\perp} . En utilisant le modèle de Wigner-Bethe-Peierls tridimensionnel, on montre que les longueurs de diffusion en dimensions réduites a_{2D} et a_{1D} sont reliés, de façon non triviale, à la longueur de diffusion tridimensionnelle a et à la longueur caractéristique du guide d'onde $a_{\perp} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{\perp}}}$:

$$a_{2D} = a_{\perp} \exp\left(\frac{C_0^{2D} - \gamma}{2} - \frac{a_{\perp}\sqrt{\pi}}{2a}\right) \quad ; \quad a_{1D} = -\frac{a_{\perp}}{2} \left[\frac{a_{\perp}}{a} + \zeta\left(\frac{1}{2}\right)\right]. \quad (3.2.1)$$

Dans l'équation (3.2.1) C_0^{2D} est une constante⁶, γ est la constante d'Euler et ζ est la fonction de Riemann :

$$C_0^{2D} \approx 1.36 \quad ; \quad \gamma \approx 0.57 \quad ; \quad \zeta\left(\frac{1}{2}\right) \approx -1.46. \quad (3.2.2)$$

On remarque que a_{2D} est bien positive alors que a_{1D} peut être aussi bien positive que négative. Il est possible d'obtenir des régimes résonants en jouant non seulement sur la longueur de diffusion tridimensionnelle, mais aussi sur le confinement. On parle alors dans ce cas de résonance induite par le confinement.

Cependant, ces expressions (3.2.1) sont obtenues à partir d'un modèle tridimensionnel qui ne prend en compte ni les effets hors de la résonance, ni la portée finie de l'interaction, ni l'existence du mécanisme de Feshbach. On s'attend donc à ce que les modèles de Wigner-Bethe-Peierls de dimensions réduites qui en découlent ne soient applicables que pour des gammes de paramètres restreintes.

Nous avons donc décidé de construire, à partir du modèle tridimensionnel réaliste qu'est le modèle à deux voies, deux modèles uni- ou bidimensionnels : les modèles de Wigner-Bethe-Peierls (2D et 1D) et les modèles de portée effective (2D et 1D). Le but est ici de tester les plages de paramètres où ces modèles donnent des résultats quantitatifs, *i.e.* des résultats suffisamment proches de ceux prédits par le modèle à deux voies pour deux atomes confinés dans un guide d'onde.

3.3 Guide d'onde

Choix du guide d'onde harmonique. Le potentiel de confinement harmonique est très souvent utilisé dans les travaux théoriques car il est une bonne approximation des potentiels utilisés dans les expériences. C'est pour cette raison que nous l'utilisons ici. D'un point de vue technique, ce potentiel est séparable ce qui est un point clef dans nos calculs. Nous donnons dans la suite de ce paragraphe quelques définitions et caractéristiques connues pour ce type de confinement qui seront utiles pour la suite.

3.3.1 Potentiel harmonique

En plus de modéliser les interactions avec le modèle à deux voies, nous considérons que les atomes, éventuellement de masses différentes m_1 et m_2 , ainsi que les molécules

6. Une expression analytique de la constante C_0^{2D} peut se trouver dans l'article [39].

sont confinés dans un piège harmonique de pulsation ω_{\perp} identique pour toutes les particules selon une ou deux directions⁷ (voir Fig. 3.4).

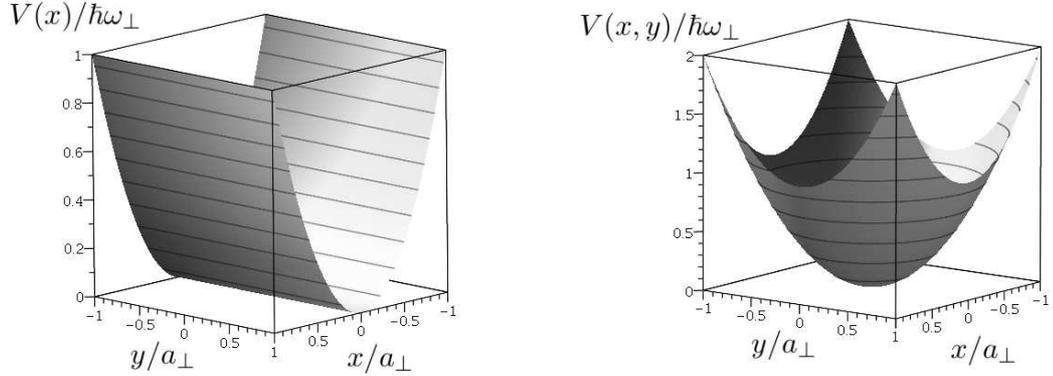


Fig. 3.4 Potentiel de piégeage harmonique engendrant un guide d'onde 2D à gauche et 1D à droite. Les axes x et y sont des axes dans le plan transverse au guide d'onde ; l'axe z correspond à l'intensité du piège.

On définit alors la longueur caractéristique pour un guide d'onde harmonique uni- ou bidimensionnel de pulsation ω_{\perp} :

$$a_{\perp} = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_{\perp}}}. \quad (3.3.1)$$

Voie ouverte. Avec ce confinement, dans le Hamiltonien à deux voies \hat{H}_{tot} défini par l'équation (2.3.1), le terme \hat{H}_0^a devient :

$$\hat{H}_0^a = \sum_{i=1}^2 \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \hat{V}_{\text{trap}}^i(\hat{\mathbf{r}}_i) \quad ; \quad \hat{V}_{\text{trap}}^i = \begin{cases} \frac{1}{2}m_i\omega_{\perp}^2 \hat{x}_i^2 & \text{guide d'onde 2D} \\ \frac{1}{2}m_i\omega_{\perp}^2 (\hat{x}_i^2 + \hat{y}_i^2) & \text{guide d'onde 1D,} \end{cases} \quad (3.3.2)$$

où l'impulsion et la position de l'atome i sont notées $\hat{\mathbf{p}}_i$ et $\hat{\mathbf{r}}_i = (\hat{x}_i, \hat{y}_i, \hat{z}_i)$. Les deux atomes sont alors confinés dans un guide d'onde uni- ou bidimensionnel (voir Fig. 3.5).

Séparabilité. Le potentiel harmonique est séparable⁸. On peut donc écrire le Hamiltonien \hat{H}_0^a de l'équation (3.3.2) dans le cas du guide d'onde harmonique comme la somme de deux Hamiltoniens, l'un n'agissant que sur les variables de centre de masse

7. Le fait de supposer que des atomes différents ressentent la même fréquence de piégeage est une hypothèse théorique difficilement vérifiable expérimentalement. De même, il n'est pas expérimentalement garanti que les atomes et les molécules de la voie fermée aient la même pulsation d'oscillation du guide d'onde [68].

8. La séparabilité n'a lieu que si les deux atomes ressentent la même fréquence de piégeage, et reste vraie même s'ils ont des masses différentes.



Fig. 3.5 Représentation schématique de deux atomes dans un guide d'onde 2D à gauche et 1D à droite.

et l'autre uniquement sur les variables relatives. Pour un guide d'onde bidimensionnel dont le piègeage est selon l'axe x , on obtient :

$$\hat{H}_0^a = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega_\perp^2 \hat{X}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega_\perp^2 \hat{x}^2, \quad (3.3.3)$$

et le cas d'un guide d'onde unidimensionnel est similaire. Dans l'équation (3.3.3), la position du centre de masse des deux atomes $\hat{\mathbf{R}} = (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ et de leur particule relative $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ ainsi que l'impulsion de leur centre de masse $\hat{\mathbf{P}}$ et celle de la particule relative $\hat{\mathbf{p}}$ sont :

$$M\hat{\mathbf{R}} = m_1\hat{\mathbf{r}}_1 + m_2\hat{\mathbf{r}}_2 \quad \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2 \quad (3.3.4)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 \quad M\hat{\mathbf{p}} = m_2\hat{\mathbf{p}}_1 - m_1\hat{\mathbf{p}}_2, \quad (3.3.5)$$

où l'on définit la masse totale M et la masse réduite du système μ :

$$M = m_1 + m_2 \quad ; \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}. \quad (3.3.6)$$

Voie fermée. La molécule de masse M dans la voie fermée ressent également la même fréquence du piège harmonique [68]. En appelant son impulsion $\hat{\mathbf{p}}_m$ et sa position $\hat{\mathbf{r}}_m = (\hat{x}_m, \hat{y}_m, \hat{z}_m)$, le terme \hat{H}_0^m s'écrit :

$$\hat{H}_0^m = \frac{\hat{p}_m^2}{2M} + \hat{V}_{\text{trap}}^m(\hat{\mathbf{r}}_m) \quad ; \quad \hat{V}_{\text{trap}}^m = \begin{cases} \frac{1}{2}M\omega_\perp^2 \hat{x}_m^2 & \text{guide d'onde 2D} \\ \frac{1}{2}M\omega_\perp^2 (\hat{x}_m^2 + \hat{y}_m^2) & \text{guide d'onde 1D,} \end{cases} \quad (3.3.7)$$

3.3.2 États propres

Les états propres pour une particule relative de masse μ sans interaction dans un tel guide d'onde sont bien connues quelle que soit la dimensionnalité du guide d'onde.

Guide d'onde 2D. Dans un guide d'onde bidimensionnel, les états propres sont les états $\{|\mathbf{k}, n\rangle\}$, où \mathbf{k} est un vecteur d'onde bidimensionnel dans le plan où les atomes

sont libres et $n \in \mathbb{N}$ numérote les états du guide d'onde harmonique transverse. Pour une particule relative, le ket $|n\rangle$ est alors défini par

$$\phi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{\exp(-\frac{x^2}{2a_\perp^2})}{\sqrt{a_\perp 2^n n!}} H_n(x/a_\perp), \quad (3.3.8)$$

où H_n est le polynôme de Hermite d'ordre n . Les énergies propres associées sont :

$$\mathcal{E}_r(\mathbf{k}, n) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \hbar\omega_\perp \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.3.9)$$

Guide d'onde 1D. Dans ce manuscrit nous utiliserons deux bases différentes d'états propres pour une particule relative confinée dans un guide d'onde unidimensionnel. La première est similaire à celle du guide d'onde bidimensionnel. Il s'agit des états $\{|k, n_x, n_y\rangle\}$ où les kets $|n_x\rangle$ et $|n_y\rangle$ sont définis par l'équation (3.3.8) dans chacune des directions x et y . Elle sera principalement utilisée au chapitre 5.

Cependant, l'interaction du modèle à deux voies agit dans le secteur s . Pour des raisons de symétrie, nous utiliserons dans le chapitre 3 la base des états $\{|k, n, m\rangle\}$ où k est le vecteur d'onde unidimensionnel dans la direction où la particule est libre et où m est le moment cinétique dans le plan transverse. Dans l'espace des configuration, ces états sont définis pour une particule relative par :

$$\langle \mathbf{r}_\perp | n, m \rangle = \left[\frac{\pi a_\perp^2 (n + |m|)!}{n!} \right]^{-1/2} \left(\frac{r_\perp}{a_\perp} \right)^{|m|} e^{im\theta} e^{-\frac{1}{2}(r_\perp/a_\perp)^2} L_n^{(|m|)}(r_\perp^2/a_\perp^2). \quad (3.3.10)$$

Dans l'équation (3.3.10), $L_n^{(\alpha)}$ est le polynôme de Laguerre généralisé, $\mathbf{r}_\perp = (r_\perp, \theta)$ sont les coordonnées polaires dans le plan de l'oscillateur harmonique et les nombres quantiques n et m peuvent prendre des valeurs indépendantes. Les énergies propres associées sont :

$$\mathcal{E}_r(k, n, m) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \hbar\omega_\perp (2n + |m| + 1) \quad ; \quad n \in \mathbb{N} \text{ et } m \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.11)$$

3.3.3 Régime monomode

Si l'énergie relative E de deux atomes qui se collisionnent dans un guide d'onde est suffisamment faible, alors seule l'état de plus basse énergie sera occupé asymptotiquement – les états excités du guide d'onde n'étant peuplés que virtuellement au voisinage de la collision. On parle alors de régime monomode. L'interaction du modèle à deux voies ne pouvant coupler que des états où n est pair (guide d'onde 2D) ou $m = 0$ (guide d'onde 1D), ce régime a lieu lorsque :

$$\frac{\hbar\omega_\perp}{2} \leq E \leq \frac{5\hbar\omega_\perp}{2} \quad (\text{guide d'onde 2D}), \quad (3.3.12)$$

$$\hbar\omega_\perp \leq E \leq 3\hbar\omega_\perp \quad (\text{guide d'onde 1D}). \quad (3.3.13)$$

Dans ce cas, on peut considérer que ce système atomique est uni- ou bidimensionnel.

3.4 Matrice de transition dans un guide d'onde

Généralités. Dans la première partie de l'article [39], nous caractérisons les propriétés collisionnelles de deux atomes dans un guide d'onde en étudiant l'opérateur de transition du modèle à deux voies ainsi que les états de diffusion. Si on considère un processus de diffusion où l'onde incidente relative est caractérisée par un ensemble de nombres quantiques α_r^0 , l'état de diffusion associé aura la forme suivante :

$$|\Psi^{\text{rel}}\rangle = |\alpha_r^0\rangle + \hat{G}_0^{\text{rel}}(E_{\text{rel}} + i0^+) \hat{T}(E_{\text{rel}} + i0^+) |\alpha_r^0\rangle, \quad (3.4.1)$$

qui sert de définition à l'opérateur de transition \hat{T} ⁹. Dans l'équation (3.4.1), la résolvante de la partie relative $\hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda)$ dépend du potentiel extérieur qui agit sur la particule relative $\hat{V}_{\text{trap}}^{\text{rel}}$ (*i.e.* du guide d'onde s'il y en a un) et est définie par :

$$\hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda) = \left(\lambda - \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \hat{V}_{\text{trap}}^{\text{rel}} \right)^{-1}. \quad (3.4.2)$$

Avec ces définitions, l'opérateur de transition du modèle à deux voies s'écrit de façon générale :

$$\hat{T}(\lambda) = \frac{|\delta_\epsilon\rangle\langle\delta_\epsilon|}{\left(g + \frac{\Lambda^2}{\lambda - E_{\text{mol}}}\right)^{-1} - \langle\delta_\epsilon|\hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda)|\delta_\epsilon\rangle}. \quad (3.4.3)$$

Dans le cas où il n'y a pas de guide d'onde ($\hat{V}_{\text{trap}}^{\text{rel}} = 0$), on retrouve l'opérateur de transition des références [65, 66] où il est étudié en détail.

3.4.1 Guide d'onde bidimensionnel

La diffusion du modèle à deux voies considéré ici n'ayant lieu que dans le secteur s , l'opérateur de transition de ce modèle ne couple que des états pairs du guide d'onde noté $n = 2p$. Les éléments de la matrice de transition entre deux états d'énergie E sont :

$$\langle \mathbf{k}', 2p' | \hat{T}(E + i0^+) | \mathbf{k}, 2p \rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} \frac{\phi_{2p'}(0)\phi_{2p}(0)}{|\phi_0(0)|^2} \frac{\left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^{p'+p} e^{\frac{(k^2-k'^2)\epsilon^2}{4}} e^{4\eta p}}{\frac{\sqrt{\pi}(1+\eta)a_\perp e^{-\eta}}{a_{\text{eff}}(E)} + J_2(\eta, \tau + i0^+)}, \quad (3.4.4)$$

où l'énergie réduite τ et le paramètre adimensionnée η sont définis par :

$$\tau = \frac{E}{2\hbar\omega_\perp} - \frac{1}{4} \quad ; \quad \eta = \frac{\epsilon^2}{2a_\perp^2}. \quad (3.4.5)$$

La fonction $J_2(\eta, \tau)$ contient toute la particularité du guide d'onde bidimensionnel et ses propriétés sont étudiées en détails dans l'article [39]. En particulier, pour des processus de basse énergie ($|\tau| \ll 1$), elle possède une divergence logarithmique caractéristique

9. Une définition plus précise permet de définir l'opérateur de transition dans tout le plan complexe.

des systèmes bidimensionnels. Sous sa forme intégrale et pour des énergies réduites négatives ($\tau < 0$), elle est définie par

$$J_2(\eta, \tau) = \int_0^\infty \frac{du}{u + 4\eta} \frac{e^{\tau(u+4\eta)}}{\sqrt{1 - e^{-u} \left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^2}} - \frac{(1+\eta)e^{4\eta\tau}}{\sqrt{\eta}}. \quad (3.4.6)$$

Son expression pour des énergies réduites positives s'obtient alors par prolongement analytique. Si on considère la limite de portée nulle, on trouve :

$$J_2(0, \tau) = P_f \int_0^\infty \frac{du}{u} \frac{e^{\tau u}}{\sqrt{1 - e^{-u}}}, \quad (3.4.7)$$

où P_f signifie la partie finie de Hadamard [88, 47].

3.4.2 Guide d'onde unidimensionnel

Pour les mêmes raisons de symétrie, l'opérateur de transition ne couple que des états de moments cinétiques nuls lors d'une interaction dans un guide d'onde unidimensionnel. En considérant deux états $|k, n, m = 0\rangle$ et $|k', n', m' = 0\rangle$ de même énergie E , ses éléments de matrice sont :

$$\langle k', n', 0 | \hat{T}(E + i0^+) | k, n, 0 \rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu\sqrt{\pi}a_\perp} \frac{\left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^{n'+n} e^{\frac{(k^2-k'^2)\epsilon^2}{4}} e^{4\eta n}}{\frac{\sqrt{\pi}(1+\eta)^2 a_\perp e^{-2\eta}}{a_{\text{eff}}(E)} + J_1(\eta, \tau + i0^+)}. \quad (3.4.8)$$

Dans le cadre d'un guide d'onde unidimensionnel, l'énergie réduite dans l'équation (3.4.8) est :

$$\tau = \frac{E}{2\hbar\omega_\perp} - \frac{1}{2}, \quad (3.4.9)$$

et le paramètre η est toujours donné par (3.4.5). La fonction $J_1(\eta, \tau)$ est caractéristique de l'interaction dans un guide d'onde unidimensionnel. En particulier, pour des énergies réduites faibles ($|\tau| \ll 1$), elle possède une divergence en $\sqrt{\frac{\pi}{-\tau}}$ spécifique aux systèmes unidimensionnels. Pour des énergies réduites négatives, son expression est :

$$J_1(\eta, \tau) = \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{u + 4\eta}} \frac{e^{\tau(u+4\eta)}}{1 - e^{-u} \left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^2} - \frac{(1+\eta)^2 e^{4\eta\tau}}{\sqrt{\eta}}. \quad (3.4.10)$$

Dans la limite de portée nulle, cette fonction tend vers la fonction zeta de Hurwitz [16, 17] :

$$J_1(0, \tau) = \sqrt{\pi} \zeta_H \left(\frac{1}{2}, -\tau \right). \quad (3.4.11)$$

3.5 Déphasages dans un guide d'onde

Nous avons déjà vu la notion de déphasages de diffusion dans un espace strictement uni ou bi-dimensionnel. Dans cette partie, nous étendons cette notion dans un guide d'onde lorsque les états transverses peuvent être peuplés asymptotiquement après la diffusion.

3.5.1 Difficultés pour définir les déphasages

Si avant la collision, la particule relative se trouve dans un état bien défini de l'oscillateur harmonique d'énergie E [voir les équations (3.3.8) et (3.3.10)] :

$$|\mathbf{k}_0, n_0 = 2p_0\rangle \quad (\text{guide d'onde 2D}) \quad ; \quad |k_0, n_0, m_0 = 0\rangle \quad (\text{guide d'onde 1D}), \quad (3.5.1)$$

cela n'est en général plus le cas après la collision. Pour un état incident donné par l'équation (3.5.1), tous les états sortants accessibles énergétiquement et compatibles avec une diffusion en onde s sont peuplés¹⁰. Leur nombre est donné par $[\tau]$ qui est la partie entière de l'énergie réduite τ définie dans les équations (3.4.5) et (3.4.9). La fonction d'onde diffusée $|\Psi_{\text{rel}}\rangle$ prend asymptotiquement la forme suivante dans un guide d'onde bidimensionnel [39] :

$$\langle \boldsymbol{\rho}, x | \Psi_{\text{rel}}^{\mathbf{k}_0, 2p_0} \rangle_{\rho \gg \epsilon, a_\perp} = \langle x | 2p_0 \rangle e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \boldsymbol{\rho}} - \frac{\mu}{\hbar^2} \sum_{p=0}^{[\tau]} \frac{e^{i(q_p \rho + \frac{\pi}{4})}}{\sqrt{2\pi q_p \rho}} \langle x | 2p \rangle \langle q_p \hat{e}_\rho, 2p | \hat{T}(E + i0^+) | \mathbf{k}_0, 2p_0 \rangle, \quad (3.5.2)$$

et dans un guide d'onde unidimensionnel :

$$\langle z, \mathbf{r}_\perp | \Psi_{\text{rel}}^{k_0, n_0, 0} \rangle_{z \gg \epsilon, a_\perp} = \langle \mathbf{r}_\perp | n_0, 0 \rangle e^{ik_0 z} - \frac{i\mu}{\hbar^2} \sum_{n=0}^{[\tau]} \frac{e^{iq_n |z|}}{q_n} \langle \mathbf{r}_\perp | n, 0 \rangle \langle q_n, n, 0 | \hat{T}(E + i0^+) | k_0, n_0, 0 \rangle. \quad (3.5.3)$$

Dans les équations (3.5.2) et (3.5.3), les éléments des matrices de transition sont définis par l'équation (3.4.4) pour un guide d'onde bidimensionnel et par (3.4.8) pour un guide d'onde unidimensionnel et la conservation de l'énergie implique que :

$$E = \frac{\hbar^2 q_p^2}{2\mu} + \hbar\omega_\perp \left(2p + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{guide d'onde 2D}) \quad (3.5.4)$$

$$E = \frac{\hbar^2 q_n^2}{2\mu} + \hbar\omega_\perp (2n + 1) \quad (\text{guide d'onde 1D}). \quad (3.5.5)$$

Lors d'un processus de diffusion, dans chacun des niveaux de l'oscillateur harmonique, chaque nombre d'onde sera différent et il n'y a pas d'unitarité dans chaque mode transverse du guide d'onde. Il n'est donc pas possible de définir des déphasages entre une onde incidente et une onde diffusée de cette manière. Ceci est représenté schématiquement par la Fig. 3.6.

3.5.2 Définition des déphasages

On peut cependant définir des déphasages en considérant une onde incidente non plus comme une onde dans un unique état de l'oscillateur harmonique transverse, mais comme une combinaison d'ondes dans les différents niveaux accessibles dans le secteur s

¹⁰. Si l'énergie de l'onde incidente est trop faible pour ne pas pouvoir peupler d'autres niveaux d'énergie du guide d'onde, *i.e.* si $[\tau] = 0$, on parle de régime monomode ; ce n'est pas le cas considéré ici.

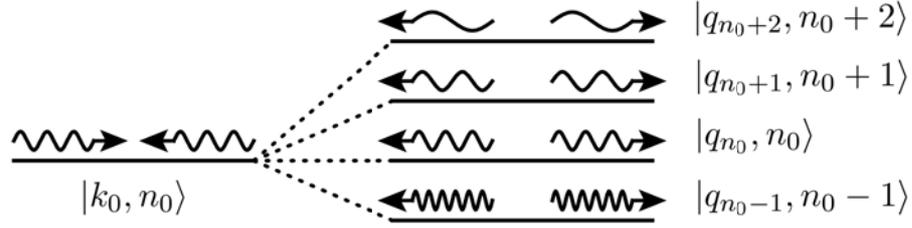


Fig. 3.6 Représentation schématique du peuplement de plusieurs états du guide d'onde après une collision.

notée $|\Psi_E\rangle$:

$$\langle \boldsymbol{\rho}, x | \Psi_E \rangle \Big|_{\rho \gg a_\perp} = \int \frac{d\theta \rho}{2\pi} \sum_{p=0}^{[\tau]} \alpha_p \langle \boldsymbol{\rho}, x | \Psi_{\text{rel}}^{q_p \hat{e}_x, 2p} \rangle \quad (\text{guide d'onde 2D}) \quad (3.5.6)$$

$$\langle z, \mathbf{r}_\perp | \Psi_E \rangle \Big|_{z \gg a_\perp} = \frac{1}{2} \sum_{\pm} \sum_{n=0}^{[\tau]} \alpha_n \langle \pm z, \mathbf{r}_\perp | \Psi_{\text{rel}}^{q_n, n, 0} \rangle \quad (\text{guide d'onde 1D}). \quad (3.5.7)$$

Nous allons définir les déphasages en cherchant une combinaison linéaire de ces états telle que le nombre d'occupation dans chaque mode transverse soit conservé après la collision et telle que les déphasages soient les mêmes pour tous les niveaux du guide d'onde. Pour cela, on projette les ket $|\Psi_E\rangle$ sur chacun des niveaux du guide d'onde¹¹ :

$$\int dx \langle 2p | x \rangle \langle \boldsymbol{\rho}, x | \Psi_E \rangle \quad ; \quad \int d^2 r_\perp \langle n, 0 | \mathbf{r}_\perp \rangle \langle z, \mathbf{r}_\perp | \Psi_E \rangle. \quad (3.5.8)$$

Dans la limite de grandes distances ($\rho \gg 1/q_p, a_\perp$ ou $z \gg 1/q_n, a_\perp$), ces projections deviennent :

$$\alpha_p \sqrt{\frac{2}{\pi q_p \rho}} \sin \left(q_p \rho + \frac{\pi}{4} \right) - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^{i(q_p \rho + \frac{\pi}{4})}}{\sqrt{2\pi q_p \rho}} \sum_{p'=0}^{[\tau]} \alpha_{p'} \langle q_p \hat{e}_\rho, 2p | \hat{T}(E + i0^+) | q_{p'} \hat{e}_x, 2p' \rangle \quad (3.5.9)$$

$$\alpha_n \cos(q_n z) - \frac{i\mu}{\hbar^2} \frac{e^{iq_n |z|}}{q_n} \sum_{n'=0}^{[\tau]} \alpha_{n'} \langle q_n, n, 0 | \hat{T}(E + i0^+) | q_{n'}, n', 0 \rangle. \quad (3.5.10)$$

En choisissant les coefficients à un facteur de normalisation $K \in \mathbb{C}$ près tels que :

$$\alpha_p = K \left(\frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^p \phi_{2p}(0) e^{-q_p^2 \epsilon^2 / 4} \quad ; \quad \alpha_n = K \left(\frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^n \frac{e^{-q_n^2 \epsilon^2 / 4}}{q_n}, \quad (3.5.11)$$

on montre que pour chaque niveau du guide d'onde, la fonction d'onde possède asymptotiquement la forme attendue lors d'une collision en dimension strictement 1 ou 2

11. À partir de maintenant et jusqu'à la fin de ce paragraphe, les équations concernant le guide d'onde 1D seront disposées à droite ou en dessous de celles concernant le guide d'onde 2D.

[voir l'équation (3.1.7)] :

$$\int dx \langle 2p|x \rangle \langle \rho, x | \Psi_E \rangle \underset{\rho \gg 1/q_p, a_\perp}{=} \frac{\alpha_p \sqrt{2} e^{i\delta(E)}}{\sqrt{\pi q_p \rho}} \sin \left[q_p \rho + \delta(E) + \frac{\pi}{4} \right], \quad (3.5.12)$$

$$\int d^2 r_\perp \langle n, 0 | \mathbf{r}_\perp \rangle \langle z, \mathbf{r}_\perp | \Psi_E \rangle \underset{z \gg 1/q_n, a_\perp}{=} \alpha_n e^{i\delta(E)} \sin \left[q_n |z| + \delta(E) + \frac{\pi}{2} \right]. \quad (3.5.13)$$

Le point clef de cette écriture est que le déphasage $\delta(E)$ ne dépend que de l'énergie totale E . Il est donc le même pour chaque niveau du guide d'onde intervenant dans l'onde incidente des équations (3.5.6) et (3.5.7), et est défini par :

$$\tan [\delta(E)] = \frac{\Im \left[\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(E + i0^+) | \delta_\epsilon \rangle \right]}{\Re \left[\left(g + \frac{\Lambda^2}{E - E_{\text{mol}}} \right)^{-1} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(E + i0^+) | \delta_\epsilon \rangle \right]}. \quad (3.5.14)$$

La forme de la définition du déphasage (3.5.14) est la même quelle que soit la dimension du guide d'onde. Cependant, ce n'est le cas ni de la matrice de transition T , ni de la résolvante G_0^{rel} , qui sont différentes si le guide d'onde est bidimensionnel (3.4.4) ou unidimensionnel (3.4.8).

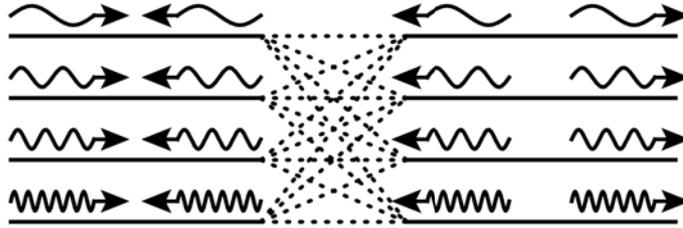


Fig. 3.7 Représentation schématique d'une superposition d'ondes dans différents états de l'oscillateur harmonique qui se conserve après une collision.

La figure 3.7 illustre une telle superposition d'onde dans différents niveaux du guide d'onde qui se conserve globalement après collision (malgré des réarrangements qui se compensent), ce qui permet de définir les déphasages.

3.6 Paramètres de la diffusion monomode dans un guide d'onde

3.6.1 Lien avec les paramètres 3D

Lorsque la collision a lieu dans le régime monomode, on peut relier les paramètres du modèle à deux voies dans un guide d'onde et ceux des modèles équivalents de Wigner-Bethe-Peierls et de portée effective pour un système strictement en dimension 1 ou 2. Nous avons ainsi trouvé pour un guide d'onde bi- et unidimensionnel les longueurs de

diffusion suivante :

$$a_{2D} = a_{\perp} \exp \left[\frac{\mathcal{C}_0^{2D}(\eta) - \gamma}{2} - \frac{\sqrt{\pi}(1+\eta)a_{\perp}e^{-\eta}}{2a_{\text{eff}}(\hbar\omega_{\perp}/2)} \right] \quad (3.6.1)$$

$$a_{1D} = \frac{-a_{\perp}(a - a^{\text{TG}})}{2(a - a_1^{\text{div}})} \left[\frac{a_{\perp}a_1^{\text{div}}(1+\eta)^2}{a_{\text{bg}}^2} + \frac{\mathcal{C}_0^{1D}(\eta)}{\sqrt{\pi}} \right], \quad (3.6.2)$$

Dans la limite de portée nulle $\epsilon \rightarrow 0$ et de résonance large $R^* \rightarrow 0$, ces longueurs de diffusion convergent vers les résultats obtenus dans les références [16, 18, 19] [voir l'équation (3.2.1)]. Ces formules généralisent donc ces expressions en prenant en plus en compte les effets hors résonance avec la longueur a_{bg} , la taille du potentiel d'interaction grâce à ϵ et la largeur de la résonance *via* le paramètre R^* (présent dans la fonction a_{eff}). Les portées effectives sont quant à elles données par :

$$R_{2D} = \mathcal{C}_1^{2D}(\eta) \frac{a_{\perp}^2}{8a_{2D}} + \frac{\sqrt{\pi} a_{\perp}(1+\eta)}{a_{2D}} \left[\frac{\epsilon^2 e^{-\eta}}{2a_{\text{eff}}(\hbar\omega_{\perp}/2)} + \frac{a_{\perp}^4}{R^* a_{\text{bg}}^2} \left(\frac{a/a_{\text{bg}} - 1}{a/a_2^{\text{div}} - 1} \right)^2 \right] \quad (3.6.3)$$

$$R_{1D}^3 = \mathcal{C}_1^{1D}(\eta) \frac{a_{\perp}^3}{8\sqrt{\pi}} + \frac{a_{\perp}^2(1+\eta)^2}{2} \left[\frac{\epsilon^2 e^{-2\eta}}{2a_{\text{eff}}(\hbar\omega_{\perp})} + \frac{a_{\perp}^4}{4R^* a_{\text{bg}}^2} \left(\frac{a/a_{\text{bg}} - 1}{a/a_1^{\text{div}} - 1} \right)^2 \right]. \quad (3.6.4)$$

Dans ces quatre équations (3.6.1)(3.6.2)(3.6.3) et (3.6.4), les quatre constantes $\mathcal{C}_j^{\text{iD}}(\eta)$ qui ne dépendent que de η , ainsi que les deux longueurs a_i^{div} et la longueur a^{TG} sont définis dans l'article [39]. Ces trois longueurs ne dépendent que des paramètres $(a_{\text{bg}}, a_{\perp}, R^*, \epsilon)$ et sont définis telles que :

$$a_{2D}(a = a_2^{\text{div}}) = 0 \text{ ou } +\infty \quad ; \quad a_{1D}(a = a_1^{\text{div}}) = \pm\infty \quad ; \quad a_{1D}(a = a^{\text{TG}}) = 0. \quad (3.6.5)$$

Les dénominations des exposants font référence soit à une divergence des longueurs de diffusion, soit au régime de Tonks-Girardeau. On voit ici que les portées effectives des équations (3.6.3) et (3.6.4) dépendent de façon très complexe des différents paramètres de la diffusion. En particulier, la portée effective en dimension réduite peut être très grande devant a_{\perp} même pour une résonance tridimensionnelle large.

3.6.2 Condition de contact uni- et bidimensionnelle

Nous donnons également, dans l'article [39], les conditions de contact vérifiées par une fonction d'onde à deux corps strictement en dimension réduite pour un modèle de portée effective, c'est-à-dire l'équivalent de (1.4.4) dans un espace purement bidimensionnel :

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall \boldsymbol{\rho} \neq 0 \quad : \quad \frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\boldsymbol{\rho}} \psi^{2D}(\boldsymbol{\rho}) = E\psi(\boldsymbol{\rho}) \\ \text{avec} \quad : \quad \lim_{\rho \rightarrow 0} \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{a_{2D}} \right) \rho \partial_{\rho} + a_{2D} R_{2D} \rho \partial_{\rho} \Delta_{\rho} \right] \langle \boldsymbol{\rho} | \hat{\Pi}_s^{2D} | \psi^{2D} \rangle = 0, \end{array} \right. \quad (3.6.6)$$

ainsi que dans un système purement unidimensionnel :

$$\begin{cases} \forall z \neq 0 & : \quad \frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta_z \psi^{1D}(z) = E\psi(z) \\ \text{avec} & : \quad \lim_{z \rightarrow 0^+} \left(1 + a_{1D} \partial_z + R_{1D}^3 \partial_z^3\right) \langle z | \hat{\Pi}_s^{1D} | \Psi \rangle = 0, \end{cases} \quad (3.6.7)$$

où les projecteurs sur l'onde s ou sur le secteur pair sont définis par :

$$\langle \rho | \hat{\Pi}_s^{2D} | \psi^{2D} \rangle = \int \frac{d\theta}{2\pi} \psi^{2D}(\rho) \quad ; \quad \langle z | \hat{\Pi}_s^{1D} | \psi^{1D} \rangle = \frac{1}{2} [\psi^{1D}(z) + \psi^{1D}(-z)]. \quad (3.6.8)$$

La condition de contact unidimensionnel (3.6.7) est d'une importance capitale dans le chapitre 4.

3.7 Énergie des dimères

Dans l'article [39], nous nous sommes particulièrement intéressé à l'existence et à l'énergie de liaison des dimères¹². En effet, nous utilisons leurs énergies comme indicateur permettant de comparer le modèle à deux voies en régime monomode, les modèles de Wigner-Bethe-Peierls et les modèles de portées effectives.

3.7.1 Dimères du modèle à deux voies tridimensionnel

Dans le cadre du modèle à deux voies sans guide d'onde, il existe deux types de dimères [66].

- Le dimère d'interaction directe n'existe que pour des valeurs de longueur de diffusion hors résonance suffisamment grande ($a_{bg} > \epsilon \sqrt{\frac{\pi}{2}}$). Il ne dépend pas du champ magnétique et sa fonction d'onde appartient principalement à la voie ouverte.
- Le dimère de Feshbach n'existe que pour des valeurs négatives du désaccord du champ magnétique [$\delta \mathcal{M}(B - B_0) < 0$]. Son existence est due au couplage entre les deux voies.

3.7.2 Dimères du modèle à deux voies dans un guide d'onde harmonique

Ces définitions peuvent être étendues lorsque les atomes sont piégés dans un guide d'onde harmonique de dimension D . Cependant, dans ce cas, un état lié est un état d'énergie inférieur à $\frac{\hbar\omega_{\perp}}{D}$ ¹³ en raison de l'énergie du point zéro du guide d'onde harmonique. Ceci permet d'étendre (ou de réduire) la plage de champ magnétique où les dimères existent. Lorsqu'un dimère existe dans un guide d'onde alors qu'il n'existerait pas en son absence, on parle de dimère induit par le confinement.

On peut alors classer les résonances en quatre catégories selon la valeur de leur longueur de diffusion hors résonance a_{bg} – contrairement au cas sans guide d'onde où il n'y en a que deux. La plage de champ magnétique pour laquelle existe un dimère

12. Les dimères sont des états liés à deux corps dans la voie ouverte qui diffèrent des molécules qui appartiennent à la voie fermée.

13. En effet dans les cas particuliers où $D = 1$ ou 2 , $(3 - D) \frac{\hbar\omega_{\perp}}{2} = \frac{\hbar\omega_{\perp}}{D}$.

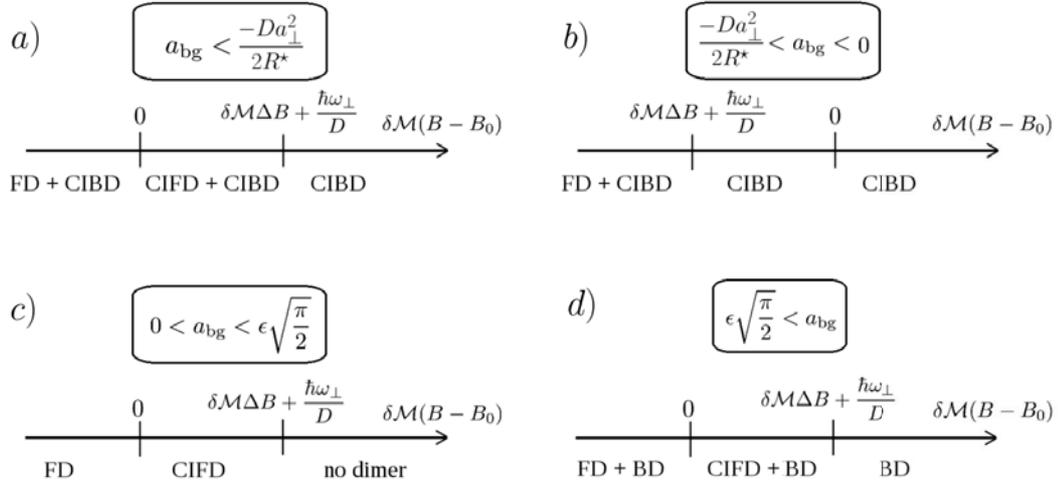


Fig. 3.8 Nombres et natures des dimères prédits par le modèle à deux voies dans un guide d'onde de dimension D en fonction de la longueur de diffusion hors résonance a_{bg} et du désaccord à la résonance. Un dimère de Feshbach (resp. d'interaction directe) qui existerait sans guide d'onde est noté FD (resp. BD). Dans le cas où le guide d'onde augmente le domaine d'existence d'un dimère de Feshbach (resp. d'interaction directe), on note ce dimère de Feshbach (resp. d'interaction directe) induit par le confinement CIFD (resp. CIBD). Dans le cas b), la plage d'existence du dimère de Feshbach est réduite par rapport à celle du cas sans guide d'onde.

particulier dépend uniquement de la catégorie dans laquelle se classe la résonance. Ces quatre situations sont résumées sur la Fig. 3.8. Quelle que soit la valeur du champ magnétique, il existe entre zéro et deux dimères.

Au voisinage de l'apparition d'un dimère, il y a souvent une grande contamination entre les deux voies. Dans ces zones, les dénominations de dimère de Feshbach ou d'interaction directe (éventuellement induit par le confinement) sont donc relativement arbitraires.

3.7.3 Comparaison entre les dimères prédits par les différents modèles

Que ce soit pour un système en dimension $D = 1$ ou 2 , le modèle de Wigner-Bethe-Peierls prédit la bonne énergie du dimère seulement pour des désaccords proches par valeurs inférieures de $\delta\mathcal{M}\Delta B + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{D}$ (voir Fig. 3.9). Pour ces valeurs de désaccord, les longueurs de diffusion a_{1D} ou a_{2D} divergent¹⁴. Dans ce voisinage, le terme de portée effective donne une contribution perturbative de petit paramètre $\frac{R_{1D}}{a_{1D}}$ ou $\frac{R_{2D}}{a_{2D}}$ ¹⁵. En effet, en appelant a_D^{div} la valeur de la longueur de diffusion 3D pour laquelle

14. Pour le cas bidimensionnel, ceci correspond à la résonance de diffusion.

15. D'où le choix des définitions de R_{1D} et R_{2D} .

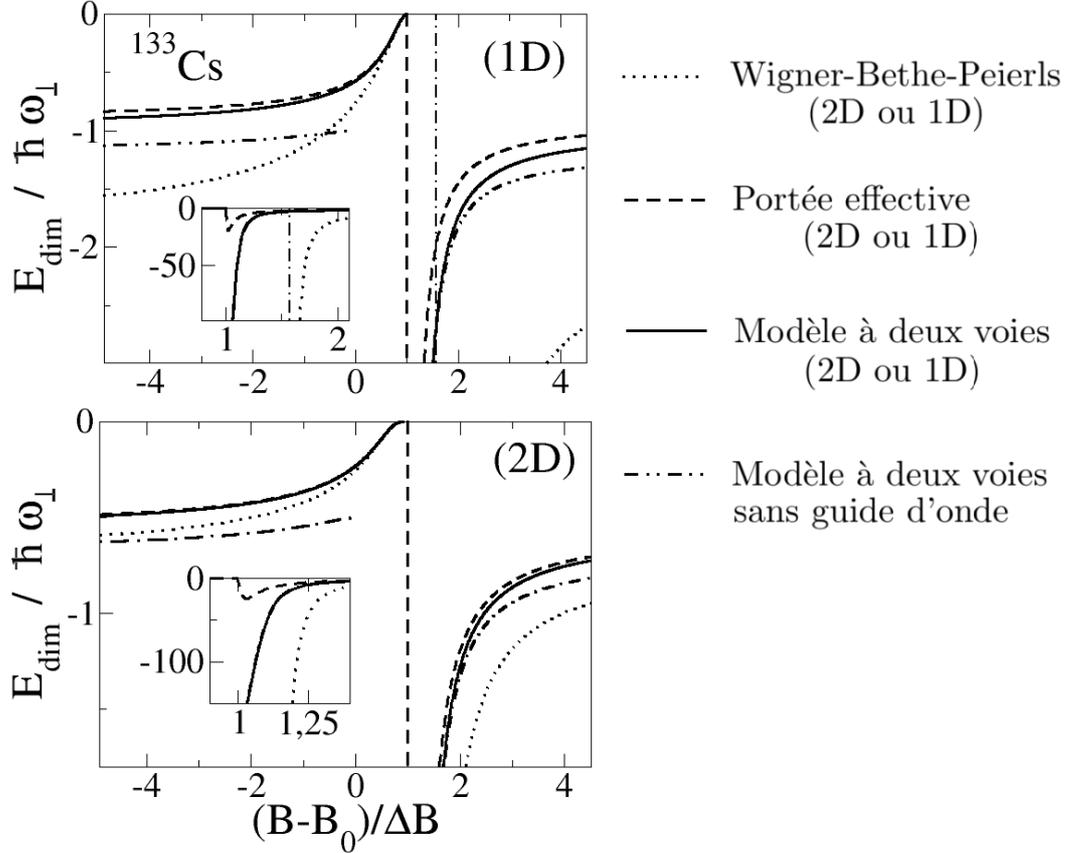


Fig. 3.9 Énergies des dimères prédites par les différents modèles dans des guides d'onde ($a_{\perp} = 1000a_0$) unidimensionnel (1D) en haut ou bidimensionnel (2D) en bas pour les paramètres de la résonance du Cs à -11.7G ($\epsilon = 100a_0$, $a_{\text{bg}} = 1720a_0$ et $R^* = 0.13a_0$, donc $0 < \epsilon\sqrt{\frac{\pi}{2}} < a_{\text{bg}}$) [39]. Dans le cas unidimensionnel, la ligne verticale en tiret-points pour $(B - B_0) / \Delta B \approx 1.58$ correspond à la valeur du champ magnétique pour laquelle il y a une résonance unidimensionnelle. Dans le cas bidimensionnel, la résonance a lieu pour un désaccord de l'ordre de 1, lorsque le dimère de basse énergie apparaît. La référence des énergies des dimères est prise par rapport à l'énergie de point zéro du guide d'ondes harmonique. Les inserts sont les mêmes courbes avec d'autres échelles.

$a_{2\text{D}}$ ou $a_{1\text{D}} \rightarrow +\infty$ [cf équation (3.6.5)], on trouve que :

$$\left| \frac{R_{1\text{D}}}{a_{1\text{D}}} \right| \propto |a - a_1^{\text{div}}|^{1/3} \quad ; \quad \left| \frac{R_{2\text{D}}}{a_{2\text{D}}} \right| \propto \frac{\exp\left(\frac{-K}{|a - a_2^{\text{div}}|}\right)}{(a - a_2^{\text{div}})^2}, \quad K \in \mathbb{R}^+. \quad (3.7.1)$$

Dans cette région, l'énergie du dimère prédite par le modèle de portée effective vaut, à l'ordre le plus bas, $E^{\text{PE}} = E^{\text{WBP}} + \delta E$ où E^{WBP} est l'énergie du dimère prédite par

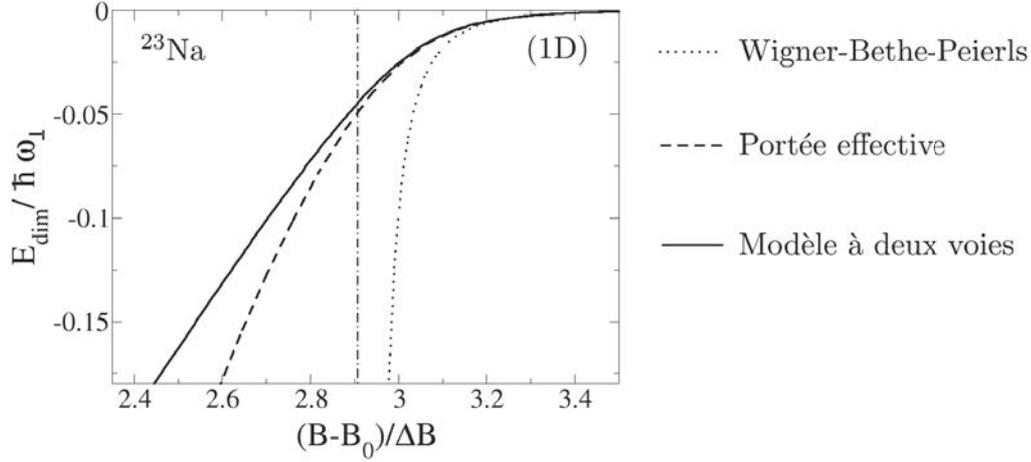


Fig. 3.10 Énergies des dimères prédits par les différents modèles dans un guide d'onde unidimensionnel ($a_{\perp} = 3000a_0$) pour les paramètres de la résonance du ^{23}Na à 853G ($\epsilon = 44a_0$, $a_{\text{bg}} = 63a_0$ et $R^* = 2.1 \times 10^5 a_0$, donc $0 < \epsilon\sqrt{\frac{\pi}{2}} < a_{\text{bg}}$) [39]. La ligne verticale en tiret-points pour $(B - B_0)/\Delta B \approx 2.9$ correspond à la valeur du champ magnétique pour laquelle il y a une résonance unidimensionnelle. La référence des énergies des dimères est prise par rapport à l'énergie de point zéro du guide d'onde harmonique. Pour les valeurs de champ magnétique réduit présentés sur cette courbe, il n'existe qu'un seul dimère. Cependant, une deuxième branche existe pour des valeurs de champ magnétique inférieures à celles présentées ici.

le modèle de Wigner-Bethe-Peierls [cf équation (3.1.10)] et où :

$$\frac{\delta E}{E^{\text{WBP}}} = -2 \left(\frac{R_{1\text{D}}}{a_{1\text{D}}} \right)^3 \quad ; \quad \frac{\delta E}{E^{\text{WBP}}} = -\frac{8}{e^{2\gamma}} \frac{R_{2\text{D}}}{a_{2\text{D}}}. \quad (3.7.2)$$

Pour les désaccords proches par valeurs supérieures de $\left(\delta\mathcal{M}\Delta B + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{D}\right)$, le modèle à deux voies prédit l'existence d'un dimère d'énergie finie (voir Fig. 3.9). Cette prédiction n'est pas vérifiée par les modèles effectifs en dimension réduite. Dans cette région, le modèle de Wigner-Bethe-Peierls prédit l'existence d'un dimère d'énergie divergente ($\rightarrow -\infty$) dans un guide d'onde 2D et pas de dimère dans un guide d'onde 1D, et le modèle de portée effective prédit quelle que soit la dimensionnalité du guide d'onde l'existence d'un dimère d'énergie qui tend vers 0. Dans ce domaine de champ magnétique, le modèle à deux voies est donc particulièrement pertinent concernant les valeurs des énergies de liaison des dimères.

Lorsque le désaccord est loin de $\left(\delta\mathcal{M}\Delta B + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{D}\right)$, le modèle de portée effective donne des prédictions beaucoup plus proches du modèle à deux voies que le modèle de Wigner-Bethe-Peierls.

3.8 Voisinage de la résonance 1D

Au voisinage de la résonance 2D où $a_{2D} \gg a_{\perp}$, les modèles de Wigner-Bethe-Peierls et de portée effective prédisent l'existence d'un dimère d'énergie petite devant $\hbar\omega_{\perp}$, ce qui est correct par rapport aux prédictions du modèle à deux voies.

Le voisinage de la résonance 1D est tout autre. En effet le modèle de Wigner-Bethe-Peierls prédit soit un dimère d'énergie infinie, soit aucun dimère, selon le côté par lequel on approche la résonance. Le modèle de portée effective et le modèle à deux voies prédisent, quant à eux, l'existence d'un dimère d'énergie finie. L'existence de ce dimère est particulièrement intéressante si :

- i) Ce dimère concerne la physique d'un système unidimensionnel
- ii) Le modèle de portée effective est valide au voisinage de la résonance unidimensionnelle pour des énergies de l'ordre de celle du dimère.

Nous avons montré que ces deux critères sont vérifiés pour les résonances telles que [39] :

$$\text{a) } R^* \gg a_{\perp} \quad \text{et} \quad \text{b) } \left| \frac{a_{\text{bg}}}{a_{\perp}} \left(\frac{R^*}{a_{\perp} + a_{\text{bg}}\zeta(1/2)} \right)^{1/3} \right| \ll 1. \quad (3.8.1)$$

Le critère i) est justifié si l'énergie du dimère est petite devant $\hbar\omega_{\perp}$. Nous avons montré que c'est le cas si la condition a) est vérifiée. Concernant le critère ii), nous avons déjà vu [voir Eq. (3.1.2)] que l'amplitude de diffusion en onde s d'un système unidimensionnel peut se développer à basse énergie :

$$f_{1D}(k) = \frac{-1}{1 + ikg_{1D}(k^2)} \quad ; \quad g_{1D}(k^2) = a_{1D} - R_{1D}^3 k^2 + l^5 k^4 + \mathcal{O}_{k \rightarrow 0}(k^7). \quad (3.8.2)$$

Au voisinage de la résonance, $a_{1D} \rightarrow 0$ et le modèle de portée effective est pertinent si le terme d'ordre 5 dans le dénominateur est négligeable devant le terme de portée effective lorsque $|k| \approx 1/R_{1D}$, donc si :

$$\left| \frac{l^5 k^4}{R_{1D}^3 k^2} \right|_{k=1/R_{1D}} \ll 1. \quad (3.8.3)$$

Le critère ii) est alors vérifié dans la limite de portée nulle ($\epsilon \ll a_{\perp}$) lorsque la condition b) est satisfaite.

Il existe des résonances, par exemple la résonance du ^{23}Na à 853G – dont les énergies des dimères sont tracées pour les trois modèles sur la Fig. 3.10 – pour lesquels R^* est suffisamment grande pour vérifier la condition a) de l'équation (3.8.1) tout en étant assez petite pour satisfaire également à la condition b). Au voisinage de la résonance 1D, dans la limite de basse énergie, la collision entre deux atomes de sodium ne peut pas être décrite par le modèle de Wigner-Bethe-Peierls, mais l'est par le modèle de portée effective.

Conséquences pour le problème à N corps. Pour ce type de résonances, les résultats prédits par le modèle de Lieb-Liniger (voir Sec. 4.3) ne peuvent pas s'appliquer car il existe des dimères d'énergie de l'ordre de $\frac{-\hbar^2}{mR_{1D}^2}$. Pour le problème à N corps, on

s'attend à ce que les phases de Tonks-Girardeau et de super Tonks-Girardeau soient remplacées par de nouvelles phases qui restent à explorer.

Dans le chapitre suivant nous étudions ce nouveau régime en examinant en détail les propriétés d'un ensemble de trois atomes avec le modèle de portée effective strictement unidimensionnel.

Article 1 : Ultracold-atom collisions in low dimensions : A two-channel analysis



Fig. 3.11 *Schéma d'un gaz bidimensionnel sur réseau, LPTMC, campus Jussieu.*

Ultracold-atom collisions in atomic waveguides: A two-channel analysis

Tom Kristensen and Ludovic Pricoupenko

*Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, UMR 7600, Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, F-75005 Paris, France**and CNRS, UMR 7600, Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, F-75005 Paris, France*

(Received 19 November 2014; revised manuscript received 29 December 2014; published 8 April 2015)

Low-dimensional behavior of two ultracold atoms trapped in two- and one-dimensional waveguides is investigated in the vicinity of a magnetic Feshbach resonance. A quantitative two-channel model for the Feshbach mechanism is used, allowing an exhaustive analysis of low-dimensional resonant scattering behavior and of the confinement-induced bound states. The role of the different parameters of the resonance is depicted in this context. Results are compared with those of the zero-range approach. The relevance of the effective range approximation in low dimensions is studied. Examples of known resonances are used to illustrate the bound-state properties.

DOI: 10.1103/PhysRevA.91.042703

PACS number(s): 34.50.Cx, 03.65.Nk, 03.65.Ge, 05.30.Jp

I. INTRODUCTION

The use of magnetic Feshbach resonances and highly anisotropic traps offers the possibility to achieve strongly correlated dilute ultracold-atomic gases. Feshbach resonances permit the tuning of the scattering length (denoted a) for two colliding atoms by using an external magnetic field [1]. The standard expression for the scattering length as a function of the external magnetic field B for a Feshbach resonance (FR) located at the magnetic field $B = B_0$ is

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

where a_{bg} is the background scattering length, i.e., the scattering length for large magnetic detuning, and ΔB is the magnetic width of the FR. Feshbach resonances can be used for many atomic species and depending on the value of the magnetic field, the ultracold gas in an optical trap can be studied in all the scattering regimes from very small interactions (for a small value of the scattering length) to the resonant regime (for a large value of the scattering length). The fine control of the trapping frequencies permits also to reach geometries where the one-dimensional (1D) or the two-dimensional (2D) behavior of the ultracold gas can be observed [2,3]. In the limit of a purely 1D (respectively 2D) geometry, atoms are free to move along one (respectively two) direction(s) whereas the system is frozen in the transverse direction(s). These configurations can be reached by using a 2D (or 1D) harmonic trap which plays the role of an atomic waveguide. This transverse trap leads to confinement-induced resonances in low-dimensional scattering, predicted in Refs. [4,5] and observed in Ref. [6].

For a gas of density n in a trap of atomic frequency ω_{\perp} and transverse length a_{\perp} , the D -dimensional behavior at temperature T is reached in the limit where $k_B T \ll \hbar\omega_{\perp}$ and $na_{\perp}^3 \ll 1$. The degenerate regime is achieved for atomic densities n larger than or of the order of $a_{\perp}^{D-3}/\lambda_T^D$ where λ_T is the de Broglie wavelength. The limit of Tonks-Girardeau and super Tonks-Girardeau [7,8] are two celebrated examples of highly correlated 1D phase which have been achieved thanks to ultracold-atoms experiments [9–11]. In the 2D geometry, the interplay between the Bose-Einstein condensate (BEC)

and the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) transitions has been subject to intensive experimental studies [12,13].

Aside from the properties of the systems in the strict 1D or 2D limits, i.e., in the monomode regime of the atomic waveguide, depending on the temperature, the atomic density, and the trap parameters, the study of the transition from three-dimensional (3D) to the low-dimensional physics has also its own fundamental interest. In ongoing studies, the quasi-1D or quasi-2D nature of the system, i.e., the population of the transverse modes of the atomic waveguide as a function of the relative energy in two-body processes is a relevant issue in the few- and many-body problems. For example, this permits us to understand the emergence of Efimov physics in confined geometries [14,15] or also the contribution of transverse modes in the experimental studies of the BKT transition [16,17].

Due to the crucial relevance of binary collisions in atomic waveguides, this paper is aimed at presenting a detailed analysis of the two-body problem for atoms in 1D and 2D atomic waveguides in the vicinity of a FR. This issue has been already the subject to many theoretical studies [4,5,18–23] where a zero-range potential approach was used and much more sophisticated multichannel studies have been performed in Refs. [24–26]. In this paper, we use a finite-range two-channel modeling of the FR resonance. This simple approach permits us to obtain quantitative results in the dimensional reduction issue from the 3D to the low-dimensional behavior, in a broad interval of the colliding energies and of the external magnetic field. Several examples of known resonances illustrate the analysis. The relevance of zero-range approaches in the context of quasi-1D or quasi-2D scattering is studied.

The paper is organized as follows. In Sec. II, we present the two-channel model used in this paper. We also give the expression of the transition operator of the model which permits us to obtain straightforwardly scattering properties in quasi-1D and quasi-2D geometries. In Sec. III, we consider two identical atoms without trapping potential. This permits us to recover the mapping between the two-channel model and the parameters describing the 3D two-body scattering in the low-energy regime. In Sec. IV (and V), we study the two-body scattering problem in a 2D (and 1D) atomic waveguide. In the monomode regime, the low-dimensional scattering length and effective range parameter in the 2D (and 1D) geometry are

exhibited. In Sec. VI, we focus on the dimers' properties in confined geometries: their domain of existence, their nature (Feshbach dimers, background dimers, confinement-induced dimers), the role of the confinement, the population of the molecular state. We apply these results to known FR which illustrate three different regimes of collisions (see Table II): (i) a broad FR of the cesium (^{133}Cs) which is characterized also by a large scattering length in the off-resonant regime (vicinity of a shape resonance); (ii) two examples of narrow FR with potassium (^{39}K) and sodium (^{23}Na); and (iii) a broad resonance of the lithium (^7Li). We compare the binding energies of dimers between the two-channel model and two models of zero-range pseudopotential (the Wigner-Bethe-Peierls model and the effective range model). Our study permits us to give the regimes where the effective range approach is relevant.

II. TWO-CHANNEL MODEL

A. Hamiltonian

All the two-channel models used in ultracold physics capture the heart of the Feshbach mechanism: the scattering resonance is a consequence of the coherent coupling between a pair of atoms in the open channel (i.e., the channel where the scattering process can be observed) and a molecular state in a closed channel [1]. They have been introduced in the context of ultracold physics in the study of the BEC-BCS crossover [27].

The two-channel model of this paper has been used in several studies of the few- and many-body problems. In the few-body problem, it gives quantitative results whereas the equations to be solved are of the same degree of complexity than those obtained with zero-range models [28–32]. The model permits us to describe quantitatively the interplay between a shape resonance (where the scattering resonance is due to the direct pairwise interaction between atoms in the open channel) and the FR: a relevant issue in the case of Cs atoms [30,33]. The resonance width is another important feature of the model, which has important consequences in the few- and many-boson properties [34–36].

In the model, atoms and molecules are structureless. The pair of atoms in the open channel, characterized by a reduced mass μ and a total mass M , is coherently coupled with a molecular state of mass M which belongs to the closed channel. In what follows, \hat{H}_0^a denotes the free Hamiltonian for two atoms and \hat{H}_0^m is the free Hamiltonian for a single molecule. Depending on the system under study, the free Hamiltonian may include an external potential acting on the positions of the atoms and of the molecule. In this paper, we consider only harmonic external potentials, so that the center of mass and the relative motions are separable. The quantum numbers which label the eigenstates of \hat{H}_0^a are denoted by (α_c) for the center of mass and (α_r) for the relative particle. The eigenstates of \hat{H}_0^m for the motion of the molecule are labeled by (α_m) :

$$\hat{H}_0^a|\alpha_r, \alpha_c\rangle = [\mathcal{E}_c(\alpha_c) + \mathcal{E}_r(\alpha_r)]|\alpha_r, \alpha_c\rangle, \quad (2)$$

$$\hat{H}_0^m|\alpha_m\rangle = [\mathcal{E}_c(\alpha_m) + E_{\text{mol}}]|\alpha_m\rangle, \quad (3)$$

where E_{mol} is the molecular energy, or internal energy of the molecule. The zero of the energies has been arbitrarily fixed at

the threshold of the atomic continuum in the free space. The molecular energy varies as a function of an applied external magnetic field B which permits us to set the scattering length at a desired value. We make the hypothesis that the detuning is sufficiently small that E_{mol} can be considered as an affine function of B . We then introduce the slope in the vicinity of the FR located at $B = B_0$:

$$\delta\mathcal{M} = \left(\frac{\partial E_{\text{mol}}}{\partial B} \right)_{B_0}, \quad (4)$$

which corresponds to the difference between the magnetic moments for an atomic pair in the open channel and the molecular state in the closed channel. The direct interaction between two atoms in the open channel \hat{V}_d is modeled by a separable potential [37]

$$\hat{V}_d = g|\delta_\epsilon\rangle\langle\delta_\epsilon|, \quad (5)$$

where g is the coupling constant and $|\delta_\epsilon\rangle$ is the ket associated with a Gaussian for the relative coordinates of the pair. In the momentum representation,

$$\langle\mathbf{k}|\delta_\epsilon\rangle \equiv \chi_\epsilon(k) \equiv \exp(-k^2\epsilon^2/4). \quad (6)$$

The parameter ϵ is of the order of the range of the interatomic forces, i.e., of the van der Waals range $\frac{1}{2}(\frac{2\mu C_6}{\hbar^2})^{1/4}$ where C_6 is the London dispersion coefficient. Typically, ϵ is of the order of few nanometers. In this paper, all the calculations are performed for finite values of ϵ . The state $|\delta_\epsilon\rangle$ for the relative particle is also used in the coupling operator \hat{V}_c between a molecular state ($|\Psi^m\rangle$) in the closed channel and a two-atom state ($|\Psi^a\rangle$) in the open channel [37]:

$$\langle\Psi^a|\hat{V}_c|\Psi^m\rangle = \Lambda\langle\Psi^a|(|\delta_\epsilon\rangle \otimes |\Psi^m\rangle), \quad (7)$$

where Λ is a real and positive parameter and the center of mass of the pair in the bra $\langle\Psi^a|$ acts on the ket $|\Psi^m\rangle$. Using these notations, the stationary Schrödinger equation at energy E can be written as

$$(E - \hat{H}_0^a)|\Psi^a\rangle = \Lambda|\delta_\epsilon\rangle \otimes |\Psi^m\rangle + g|\delta_\epsilon\rangle \otimes \langle\delta_\epsilon|\Psi^a\rangle, \quad (8)$$

$$(E - \hat{H}_0^m)|\Psi^m\rangle = \Lambda\langle\delta_\epsilon|\Psi^a\rangle. \quad (9)$$

B. Transition operator

In this section, we derive the transition operator of our two-channel model. As it will be shown, the transition matrix in low dimensions follows straightforwardly from its expression. For this purpose, we introduce the resolvents $\hat{G}_0^a(\lambda)$ for an atomic pair and $\hat{G}_0^m(\lambda)$ for a molecule:

$$\hat{G}_0^a(\lambda) = (\lambda - \hat{H}_0^a)^{-1}; \quad \hat{G}_0^m(\lambda) = (\lambda - \hat{H}_0^m)^{-1}. \quad (10)$$

After some algebra, one finds for a scattering process at energy E with an incoming state in the open channel $|\Psi^0\rangle$

$$|\Psi^a\rangle = |\Psi^0\rangle + \hat{G}_0^a(E + i0^+)|\delta_\epsilon\rangle \otimes [g + \Lambda^2\hat{G}_0^m(E)]\langle\delta_\epsilon|\Psi^a\rangle, \quad (11)$$

where

$$\langle\delta_\epsilon|\Psi^a\rangle = \{ \mathbb{1}_{\text{mol}} - \langle\delta_\epsilon|\hat{G}_0^a(E + i0^+)|\delta_\epsilon\rangle \}^{-1} \times [g + \Lambda^2\hat{G}_0^m(E)]^{-1} \langle\delta_\epsilon|\Psi^0\rangle. \quad (12)$$

The incoming state $|\Psi^0\rangle \equiv |\alpha_r^0, \alpha_c^0\rangle$ is an eigenstate of \hat{H}_0^a . The form of the coherent coupling in Eqs. (8) and (9) implies that the center of mass of the molecule and of the atomic pair have the same quantum numbers: $\alpha_m^0 = \alpha_c^0$.

The collisional properties of the atomic pair depend on the relative energy E_{rel} , i.e., the energy of the pair in its center-of-mass frame:

$$E_{\text{rel}} \equiv \mathcal{E}_r(\alpha_r^0) = E - \mathcal{E}_c(\alpha_c^0). \quad (13)$$

We continue our study in the center-of-mass frame, where the wave function for the relative motion of the pair at energy E_{rel} is denoted by $|\Psi_{\text{rel}}\rangle$. The general expression for the scattering state is

$$|\Psi_{\text{rel}}\rangle = |\alpha_r^0\rangle + \hat{G}_0^{\text{rel}}(E_{\text{rel}} + i0^+) \hat{T}(E_{\text{rel}} + i0^+) |\alpha_r^0\rangle, \quad (14)$$

where the transition operator of the two-channel model is

$$\hat{T}(\lambda) = \frac{|\delta_\epsilon\rangle\langle\delta_\epsilon|}{\left(g + \frac{\Lambda^2}{\lambda - E_{\text{mol}}}\right)^{-1} - \langle\delta_\epsilon|\hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda)|\delta_\epsilon\rangle}, \quad (15)$$

and $\hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda)$ is the resolvent for the relative particle which depends on the external potential:

$$\hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda) = \left(\lambda - \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \hat{V}_{\text{trap}}^{\text{rel}}\right)^{-1}. \quad (16)$$

In Eq. (16), \hat{p} is the relative momentum of the pair and $\hat{V}_{\text{trap}}^{\text{rel}}$ is the part of the trap potential which acts only on the relative particle.

III. TWO PARTICLES IN THE FREE SPACE

In this section, we recall the mapping between the parameters of the model ($E_{\text{mol}}, \delta\mathcal{M}, \epsilon, \Lambda, g$) and the low-energy scattering features for two particles in the free space. In this situation, there is no external potential and $\alpha_r = \mathbf{k}$ is the momentum of the relative particle.

The on-shell transition matrix for a scattering process at a relative energy $\lambda = E_{\text{rel}} > 0$ is deduced from Eq. (15) which gives the transition matrix of Refs. [28,30,37]. The standard expression for the scattering length as a function of the external magnetic field in Eq. (1) is obtained by the mapping

$$B - B_0 = \frac{E_{\text{mol}}}{\delta\mathcal{M}} - \frac{\Lambda^2}{g\delta\mathcal{M}} + \Delta B, \quad (17)$$

$$\Delta B = \frac{2\pi\hbar^2\Lambda^2 a_{\text{bg}}}{\mu g^2 \delta\mathcal{M}}, \quad (18)$$

$$a_{\text{bg}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\epsilon g}{g - g^c} \quad \text{with} \quad g^c = -\frac{\sqrt{2}\pi^{3/2}\hbar^2\epsilon}{\mu}. \quad (19)$$

In this paper, we also use the width parameter R^* [34]:

$$R^* = \frac{\hbar^2}{2\mu a_{\text{bg}} \delta\mathcal{M} \Delta B}. \quad (20)$$

This length, which is always positive, characterizes the width of resonance: for narrow resonances, it is large as compared to the range of the interatomic forces.

Using these definitions, for an incoming wave number k_{rel} and an energy $E_{\text{rel}} = \hbar^2 k_{\text{rel}}^2 / (2\mu)$, one can introduce an

energy-dependent scattering length

$$a_{\text{eff}}(E_{\text{rel}}) = [\chi_\epsilon(k_{\text{rel}})]^2 \left[\frac{1}{a} + \frac{R^* \left(1 - \frac{a_{\text{bg}}}{a}\right)^2 k_{\text{rel}}^2}{R^* a_{\text{bg}} \left(1 - \frac{a_{\text{bg}}}{a}\right) k_{\text{rel}}^2 + 1} \right]^{-1}. \quad (21)$$

The length a_{eff} permits us to simplify the expression of the on-shell transition matrix in the free space with

$$\langle \mathbf{k}_{\text{rel}} | \hat{T}(E_{\text{rel}}) | \mathbf{k}_{\text{rel}} \rangle = \frac{\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}}{\frac{1}{a_{\text{eff}}(E_{\text{rel}})} + ik_{\text{rel}} \text{erfc}\left(\frac{-i\epsilon k_{\text{rel}}}{\sqrt{2}}\right)}. \quad (22)$$

We close this section by recalling the main results on the 3D bound states of the model. At this stage, it is worth pointing out that in this paper, a dimer denotes a bound state of two particles in the open channel and is not a molecule which belongs to the closed channel. The binding energies of the dimers $E_{\text{dim}} = \frac{-\hbar^2 q^2}{2\mu}$, where the binding wave number q is positive ($q > 0$), are given by the poles of the transition matrix in Eq. (22). They have been already studied in Ref. [30]. One can distinguish two types of dimers: (i) the background dimer (BD), which results from the direct interaction in the open channel without interchannel coupling; (ii) the Feshbach dimer (FD), which results from the coupling between a pair of atoms and the molecular state. The Feshbach dimer can be seen as a contamination of the open channel by the molecular state due to the coupling with pairs of atoms. For a large and negative energy detuning, the binding energy of the Feshbach dimer verifies

$$E_{\text{dim}} = E_{\text{mol}} + \frac{\delta\mathcal{M}\Delta B}{E_{\text{mol}}} \frac{\hbar^2}{2\mu\epsilon^2} \frac{\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a_{\text{bg}}}{\epsilon}}{\left(1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a_{\text{bg}}}{\epsilon}\right)^2} + \dots \quad (23)$$

As expected, it tends to the molecular energy, meaning that the occupation probability of the pair in the open channel tends to zero.

In this model, the BD exists only in the domain where $a_{\text{bg}} > \sqrt{\pi}\epsilon/\sqrt{2}$ and the FD exists for negative-energy detuning, i.e., for $\delta\mathcal{M}(B - B_0) < 0$. In the presence of a BD, in the intermediate regime of negative-energy detuning there is a level crossing between the BD and the FD corresponding to a large hybridization between the two types of dimers. Consequently, the denomination of BD and FD is somehow arbitrary in this region. The domain of existence of the dimers is summarized in Table I.

In Table II, we have gathered the values of the parameters $a_{\text{bg}}, \epsilon, R^*$ for FR taken as examples in this paper. The parameter ϵ is of the order of the range of the interatomic forces. When spectroscopic data or *ab initio* predictions on dimers binding energies are available, a precise value of the short-range parameter ϵ can be determined. In this case, the model permits

TABLE I. Domain of existence of the Feshbach dimer (denoted FD) and background dimer (denoted BD) in the free space as a function of the energy detuning $\delta\mathcal{M} \times (B - B_0)$.

	$\delta\mathcal{M}(B - B_0) < 0$	$\delta\mathcal{M}(B - B_0) > 0$
$a_{\text{bg}} < \epsilon\sqrt{\frac{\pi}{2}}$	FD	No dimer
$a_{\text{bg}} > \epsilon\sqrt{\frac{\pi}{2}}$	FD + BD	BD

TABLE II. Characteristic lengths of FR considered in this paper [1,38]. The length a_0 is the Bohr radius, B_0 is the magnetic field value at resonance, a_{bg} is the background scattering length, and R^* is defined in Eq. (20).

Species	B_0 (G)	ΔB (G)	a_{bg}/a_0	ϵ/a_0	R^*/a_0
^{133}Cs	-11.7	28.7	1720	100	0.13
^{39}K	752.4	-0.4	-35	65	1200
^7Li	736.8	-192.3	-25	33	39.6
^{23}Na	853	0.0025	63	44	2.1×10^5

us to describe quantitatively the dimer spectrum for large detunings [28,30]. In other cases, we have set ϵ at the value of the van der Waals range.

IV. QUASI-2D GEOMETRY

A. Scattering in a 1D transverse harmonic trap

We consider a planar atomic waveguide consisting of a harmonic trap of atomic frequency ω_\perp in the x direction. The particles are thus free to move along the two other directions. The characteristic length of the trap for the relative particle is denoted by

$$a_\perp = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_\perp}}. \quad (24)$$

The quantum numbers for the relative motion are denoted by $\alpha_r \equiv (\mathbf{k}, n)$, where \mathbf{k} is a 2D vector and n labels the states of the harmonic oscillator. The corresponding eigenenergies are

$$\mathcal{E}_r(\mathbf{k}, n) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \hbar\omega_\perp \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (25)$$

In what follows, $\phi_n(x)$ denotes the eigenfunctions of the harmonic trap:

$$\phi_n(x) \equiv \langle x | n \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{\exp\left(-\frac{x^2}{2a_\perp^2}\right)}{\sqrt{a_\perp 2^n n!}} H_n(x/a_\perp). \quad (26)$$

For convenience, we use in this paper the following reduced parameters:

$$\tau \equiv \frac{\lambda}{2\hbar\omega_\perp} - \frac{1}{2D} \quad \text{and} \quad \eta \equiv \frac{\epsilon^2}{2a_\perp^2}. \quad (27)$$

For the planar atomic waveguide, $D = 2$ and thus $\tau = \lambda/2\hbar\omega_\perp - 1/4$.

We now consider a scattering process where the incoming wave of relative energy $E_{\text{rel}} = E_0$ ($E_0 \geq \frac{\hbar\omega_\perp}{2}$) populates only one transverse mode n_0 . The interaction acts only in the s -wave sector, consequently, scattering occurs iff n_0 is even and the outgoing state can populate only even transverse modes. We then introduce the integer $p_0 = n_0/2$. The incoming state is characterized by a 2D momentum \mathbf{k}_0 [i.e., $\alpha_r^0 = (\mathbf{k}_0, 2p_0)$] and $E_0 = \mathcal{E}_r(\mathbf{k}_0, 2p_0)$ with

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu} + \hbar\omega_\perp \left(2p_0 + \frac{1}{2} \right); \quad \tau_0 = \frac{E_0 - \frac{\hbar\omega_\perp}{2}}{2\hbar\omega_\perp}. \quad (28)$$

The outgoing state is a coherent superposition of cylindrical waves characterized by the quantum numbers $\alpha_r = (\mathbf{q}_p, 2p)$.

The conservation of energy gives

$$q_p = \sqrt{\frac{2\mu E_0}{\hbar^2} - \frac{4p+1}{a_\perp^2}}. \quad (29)$$

Equation (29) shows that after the scattering process, for a state of relative energy $E_0 > \hbar\omega_\perp/2$, only the transverse modes of quantum numbers smaller or equal to $2\tau_0$ are populated in the open channel. Hence, if $\frac{\hbar\omega_\perp}{2} < E_0 < \frac{5\hbar\omega_\perp}{2}$, only the first transverse mode is populated for large interatomic distances ρ ($\rho \gg \epsilon, a_\perp$): this corresponds to the monomode regime of the planar atomic waveguide. For $E_0 \geq \frac{5\hbar\omega_\perp}{2}$, the number of even transverse modes populated after the scattering process is given by $\lfloor \tau_0 \rfloor$ where $\lfloor \dots \rfloor$ indicates the integer part. For increasing values of the relative energy E_0 , a new 2D continuum is opened when τ_0 crosses an integer value.

Equation (15) shows that the scattering properties in the planar atomic waveguide are deduced from the behavior of the function

$$\langle \delta_\epsilon | \hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda) | \delta_\epsilon \rangle = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\chi_\epsilon(k) \langle \delta_\epsilon^{\text{1D}} | n \rangle|^2}{\lambda - \mathcal{E}_r(\mathbf{k}, n)}. \quad (30)$$

In Eq. (30), $|\delta_\epsilon^{\text{1D}}\rangle$ is the Gaussian state associated with the transverse degree of freedom. In the configuration space, its representation is

$$\langle x | \delta_\epsilon^{\text{1D}} \rangle = \frac{1}{\epsilon\sqrt{\pi}} \exp(-x^2/\epsilon^2). \quad (31)$$

The transition matrix between the incoming state $|\alpha_r^0\rangle = |\mathbf{k}_0, 2p_0\rangle$ and the outgoing state $|\alpha_r\rangle = |\mathbf{q}_p, 2p\rangle$ can be written

$$\begin{aligned} \langle \alpha_r | \hat{T}(E_0 + i0^+) | \alpha_r^0 \rangle &= \left(\frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^{p_0+p} \frac{\phi_{2p}(0)\phi_{2p_0}(0)}{|\phi_0(0)|^2} \\ &\times \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} \frac{e^{\frac{(k_0^2 - q_p^2)\epsilon^2}{4}} e^{4\eta p_0}}{\frac{\sqrt{\pi}(1+\eta)a_\perp e^{-\eta}}{a_{\text{eff}}(E_0)} + J_2(\eta, \tau_0 + i0^+)}, \end{aligned} \quad (32)$$

where the function $J_2(\eta, \tau)$ is defined by

$$\begin{aligned} J_2(\eta, \tau) &\equiv -\frac{2\pi\hbar^2}{\mu} \frac{e^{4\eta\tau}}{|\langle \delta_\epsilon^{\text{1D}} | n=0 \rangle|^2} \\ &\times \left[\langle \delta_\epsilon | \hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda) | \delta_\epsilon \rangle + \frac{\mu}{\sqrt{2\pi} 3/2 \hbar^2 \epsilon} \right], \end{aligned} \quad (33)$$

where the energy λ is given by Eq. (27). In the configuration space and in the limit of large interparticle distances, the scattering state is

$$\begin{aligned} \langle \rho, x | \Psi_{\text{rel}}^{\mathbf{k}_0, 2p_0} \rangle_{\rho \gg \epsilon, a_\perp} &= \phi_{2p_0}(x) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \rho} - \frac{\mu}{\hbar^2} \sum_{p=0}^{\lfloor \tau_0 \rfloor} \phi_{2p}(x) \\ &\times \frac{e^{i(q_p \rho + \frac{\pi}{4})}}{\sqrt{2\pi} q_p \rho} \langle q_p \hat{e}_\rho, 2p | \hat{T}(E_0 + i0^+) | \mathbf{k}_0, 2p_0 \rangle. \end{aligned} \quad (34)$$

In what follows, we study the behavior of the function $J_2(\eta, \tau)$ which is in the denominator of the T matrix in Eq. (32).

For this purpose, we perform the change of variable $y = ka_{\perp}/2$ in Eq. (30) and consider the domain of negative reduced energies: $\tau < 0$. This permits us to use the transformation

$$\frac{1}{\tau - y^2 - n/2} = - \int_0^{\infty} du e^{u(\tau - n/2 - y^2)}. \quad (35)$$

The summation over the variable n in Eq. (30) is achieved in the Appendix. After integration over the variable y , one obtains

$$J_2(\eta, \tau) = \int_0^{\infty} \frac{du}{u + 4\eta} \frac{e^{\tau(u+4\eta)}}{\sqrt{1 - e^{-u} \left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^2}} - \frac{(1+\eta)e^{4\eta\tau}}{\sqrt{\eta}}. \quad (36)$$

In the limit of a vanishingly small reduced energy ($\tau \rightarrow 0$), the function $J_2(\eta, \tau)$ exhibits a logarithmic singularity, which is a characteristic of the quasi-2D geometry:

$$J_2(\eta, \tau) = -\ln(-\tau e^{\gamma}) - C_0^{2D}(\eta) + C_1^{2D}(\eta)\tau + O(\tau^2). \quad (37)$$

In Eq. (37), $\gamma = 0.577\dots$ is the Euler constant,

$$C_0^{2D}(\eta) = \sqrt{\eta} - \int_0^{\infty} \frac{du}{u + 4\eta} \times \left[\frac{1}{\sqrt{1 - e^{-u} \left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^2}} - \frac{1}{\sqrt{u + 4\eta}} - \frac{u + 4\eta}{u + 1} \right] \quad (38)$$

and

$$C_1^{2D}(\eta) = 2 \ln \left[\frac{2(1+\eta)}{(1+\sqrt{\eta})^2} \right] - 4\eta - 4(1+\eta)\sqrt{\eta}. \quad (39)$$

In the general case where τ is a complex variable on the physical sheet (i.e., the complex plane with the branch cut \mathbb{R}^+), the function $J_2(\eta, \tau)$ can be represented by the following series expansion:

$$J_2(\eta, \tau) = -\frac{(1+\eta)}{\sqrt{\eta}}(e^{4\eta\tau} - 1) - C_0^{2D}(\eta) + \ln(4\eta) + E_1(-4\eta\tau) - \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^{2p} \frac{(2p-1)!!}{(2p)!!} \times e^{4\eta p} \{E_1(4\eta p) - E_1[4\eta(p-\tau)]\}. \quad (40)$$

When a continuum is opened in the scattering process, one uses the analytic continuation for the exponential integral function E_1 in the calculation of $J_2(\eta, \tau_0 + i0^+)$ defined in Eq. (40) [39]:

$$E_1(-x - i0^+) = -E_i(x) + i\pi \quad (x > 0). \quad (41)$$

B. Low energy and zero-range limit

In usual situations, the typical radius of interatomic forces is negligible as compared to the transverse length a_{\perp} ($\epsilon \ll a_{\perp}$ or equivalently $\eta \ll 1$). Thus, in Eq. (37) one can use the zero-range limit of the parameters defined in Eqs. (38) and (39):

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} C_0^{2D}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{du}{u} \left[\frac{-1}{\sqrt{1 - e^{-u}}} + \frac{1}{\sqrt{u}} + \frac{u}{u+1} \right] \quad (42)$$

$$= 1.3605\dots, \quad (43)$$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} C_1^{2D}(\eta) = 2 \ln(2). \quad (44)$$

We now consider a low-energy process. At large interatomic distances, only few transverse modes are populated, and the product $\eta\tau_0$ is very small as compared to unity. One can then use with a high accuracy the zero-range limit for $J_2(\eta, \tau)$ by using the integral representation

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} J_2(\eta, \tau) = P_f \int_0^{\infty} \frac{du}{u} \frac{e^{\tau u}}{\sqrt{1 - e^{-u}}}, \quad (45)$$

where P_f denotes the Hadamard finite part of the integral [40]. In this regime, one can also perform the zero-range limit in the series expansion of Eq. (40):

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} J_2(\eta, \tau_0 + i0^+) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(2p-1)!!}{(2p)!!} \ln \left| \frac{p}{p - \tau_0} \right| + \ln \left(\frac{-B}{2\pi\tau_0} \right) + i\pi \left[\frac{(2\lfloor\tau_0\rfloor + 1)!!}{(2\lfloor\tau_0\rfloor)!!} - 1 \right] \quad (46)$$

where $B = 2\pi \times \exp[-\gamma - C_0^{2D}(0)] = 0.9049\dots$. Equation (46) permits us to recover the results deduced by using the zero-range potential approach [18,21–23].

C. Monomode regime in a 2D atomic waveguide

1. Scattering amplitude and resonance

In the monomode regime, the collisional energy E_0 verifies $\frac{\hbar\omega_{\perp}}{2} < E_0 < \frac{5\hbar\omega_{\perp}}{2}$. The 2D scattering amplitude f_{2D} is defined from the behavior of the wave function at large distances:

$$\langle \rho, x | \Psi_{\text{rel}}^{k_0, 0} \rangle \sim \phi_0(x) \left[e^{ik_0 \cdot \rho} + \frac{\sqrt{\pi} f_{2D}(k_0)}{\sqrt{2k_0\rho}} e^{i(k_0\rho + \frac{\pi}{4})} \right]. \quad (47)$$

The 2D scattering amplitude f_{2D} is the basic ingredient which characterizes the two-body interaction in 2D dilute systems. Near the threshold of the propagating regime ($E_0 \rightarrow \frac{\hbar\omega_{\perp}}{2}^+$), in the effective range approximation, the 2D scattering amplitude is of the form

$$f_{2D}(k_0) = \frac{1}{\ln(k_0 a_{2D} e^{\gamma}/2) - a_{2D} R_{2D} k_0^2 - \frac{i\pi}{2}}. \quad (48)$$

In Eq. (48), we have introduced the 2D scattering length

$$a_{2D} = a_{\perp} \exp \left[\frac{C_0^{2D}(\eta) - \gamma}{2} - \frac{\sqrt{\pi}(1+\eta)a_{\perp}e^{-\eta}}{2a_{\text{eff}}(\hbar\omega_{\perp}/2)} \right], \quad (49)$$

and the 2D effective range parameter R_{2D} :

$$R_{2D} = C_1^{2D}(\eta) \frac{a_{\perp}^2}{8a_{2D}} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} (1+\eta) \frac{a_{\perp}}{a_{2D}} \left[\frac{\epsilon^2 e^{-\eta}}{2a_{\text{eff}}(\hbar\omega_{\perp}/2)} + \frac{a_{\perp}^4}{R^* a_{\text{bg}}^2} \left(\frac{a/a_{\text{bg}} - 1}{a/a_2^{\text{div}} - 1} \right)^2 \right]. \quad (50)$$

The length a_2^{div} which appears in Eq. (50) corresponds to the value of the 3D scattering length a , such that a_{2D} diverges; more precisely, $a_{2D} \rightarrow +\infty$ for $a \rightarrow (a_2^{\text{div}})^-$. The expression of a_2^{div} is given by

$$a_2^{\text{div}} = \frac{a_{\text{bg}}}{1 + 2\delta\mathcal{M}\Delta B/\hbar\omega_{\perp}}. \quad (51)$$

The 2D scattering length a_{2D} in Eq. (49) can be tuned from 0 to $+\infty$ by playing with the value of the external magnetic field.

The resonant regime in 2D scattering occurs for large values of a_{2D}/a_{\perp} , that is, when the 3D scattering length a is smaller and almost equals to a_2^{div} . The resonance corresponds to a maximum in the scattering amplitude which appears at a 2D collisional momentum $k_0 \sim k_{\text{res}} = \frac{2e^{-\gamma}}{a_{2D}}$. The width of this scattering resonance $\Delta k/k_0$ is of the order of unity.

2. 2D zero-range models

The expression of the 2D scattering amplitude in Eq. (48) can be deduced exactly from a purely 2D and zero-range potential model that we denote as the 2D effective range model (2D-ERM). In this approach, the two-body wave function for the relative motion denoted by ψ_{2D} depends only on the 2D relative coordinates ρ . The interaction is replaced by imposing the following contact condition on the wave function

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{a_{2D}} \right) \rho \partial_{\rho} + a_{2D} R_{2D} \rho \partial_{\rho} \Delta_{\rho} \right] \langle \rho | \hat{\Pi}_s^{2D} | \psi_{2D} \rangle = 0, \quad (52)$$

where $\hat{\Pi}_s^{2D}$ is the projector on the 2D s -wave channel:

$$\langle \rho | \hat{\Pi}_s^{2D} | \psi_{2D} \rangle = \int \frac{d\theta}{2\pi} \langle \rho | \psi_{2D} \rangle \text{ where } \theta = \angle(\rho, \hat{e}_y). \quad (53)$$

In the few- and many-body problem, the contact condition is imposed on the wave function for each interacting pair of atoms and the limit on the relative coordinates is taken for a fixed value of the other coordinates. Equation (52) generalizes the 2D Wigner-Bethe-Peierls (WBP) model where the effective range term is set to zero ($R_{2D} = 0$).

V. QUASI-1D GEOMETRY

A. Scattering in a 2D transverse harmonic trap

In this section, the pair of atoms move in a linear atomic waveguide made of a harmonic trap with the same atomic frequency ω_{\perp} in the x and y directions. The quantum numbers for the relative motion are denoted by $\alpha_r \equiv (k, n, m)$ where $m\hbar$ is the angular momentum along z and

$$\mathcal{E}_r(k, n, m) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \hbar\omega_{\perp}(2n + |m| + 1). \quad (54)$$

The eigenfunctions of the transverse harmonic oscillator are given by

$$\langle \mathbf{r}_{\perp} | n, m \rangle = \left[\frac{\pi a_{\perp}^2 (n + |m|)!}{n!} \right]^{-1/2} \left(\frac{r_{\perp}}{a_{\perp}} \right)^{|m|} e^{im\theta} \times e^{-\frac{1}{2}(r_{\perp}/a_{\perp})^2} L_n^{(|m|)}(r_{\perp}^2/a_{\perp}^2). \quad (55)$$

In Eq. (55), $L_n^{(\alpha)}$ is the generalized Laguerre polynomial and $\mathbf{r}_{\perp} = (r_{\perp}, \theta)$ are the polar coordinates in the x - y plane.

In this section, we use the reduced energy defined in Eq. (27) with $D = 1$ that is $\tau = \lambda/(2\hbar\omega_{\perp}) - 1/2$. For a scattering state of incoming wave $\alpha_r^0 \equiv (k_0, n_0, m_0)$, the reduced energy $\tau = \tau_0$ is

$$\tau_0 = \frac{k_0^2 a_{\perp}^2}{4} + n_0 + \frac{|m_0|}{2}. \quad (56)$$

Similarly to the 2D atomic waveguide, the threshold of each 1D continuum corresponds to an integer value of τ_0 . The

integer $\lfloor \tau_0 \rfloor$ is the number of occupied transverse states in the outgoing state. Due to the s -wave character of the interaction, the matrix elements are nonzero only between eigenstates with zero angular momentum. For each transverse state $|n, m = 0\rangle$ occupied by the outgoing wave, we define the wave number q_n , obtained by energy conservation

$$q_n = \sqrt{\frac{2\mu E_0}{\hbar^2} - \frac{4n + 2}{a_{\perp}^2}}. \quad (57)$$

Using this notation, the T -matrix can be written as

$$\langle q_n, n, m | \hat{T}(E_0 + i0^+) | k_0, n_0, m_0 \rangle = \delta_{m,0} \delta_{m_0,0} \frac{2\pi \hbar^2}{\mu \sqrt{\pi} a_{\perp}} \times \left(\frac{1 - \eta}{1 + \eta} \right)^{n+n_0} \frac{e^{\frac{(k_0^2 - q_n^2)\epsilon^2}{4}} e^{4\eta n_0}}{\frac{\sqrt{\pi} a_{\perp} (1+\eta)^2 e^{-2\eta}}{a_{\text{eff}}(E_0)} + J_1(\eta, \tau_0 + i0^+)}, \quad (58)$$

where the function $J_1(\eta, \tau)$ is defined by

$$J_1(\eta, \tau) \equiv -\frac{2\pi \hbar^2}{\mu} \frac{|\phi_0(0)|^2 e^{4\eta\tau}}{|\delta_{\epsilon}^{\text{1D}} | n = 0 \rangle|^4} \times \left[\langle \delta_{\epsilon} | \hat{G}_0^{\text{rel}}(\lambda) | \delta_{\epsilon} \rangle + \frac{\mu}{\sqrt{2\pi} \hbar^2 \epsilon} \right], \quad (59)$$

where the energy λ is given by Eq. (27). In the limit of large interparticle distances ($z \gg \epsilon, a_{\perp}$), the scattering wave function verifies

$$\langle z, \mathbf{r}_{\perp} | \Psi_{\text{rel}}^{k_0, n_0, 0} \rangle_{z \gg \epsilon, a_{\perp}} = \langle \mathbf{r}_{\perp} | n_0, 0 \rangle e^{ik_0 z} - \frac{i\mu}{\hbar^2} \sum_{n=0}^{\lfloor \tau_0 \rfloor} \frac{e^{iq_n |z|}}{q_n} \times \langle \mathbf{r}_{\perp} | n, 0 \rangle \langle q_n, n, 0 | \hat{T}(E_0 + i0^+) | k_0, n_0, 0 \rangle. \quad (60)$$

Following the same reasoning as in Sec. IV, one obtains a simple expression of $J_1(\eta, \tau)$ for negative values of τ :

$$J_1(\eta, \tau) = \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u+4\eta}} \frac{e^{\tau(u+4\eta)}}{1 - e^{-u} \left(\frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^2} - \frac{(1+\eta)^2 e^{4\eta\tau}}{\sqrt{\eta}}. \quad (61)$$

In the limit of vanishingly small reduced energy $\tau \rightarrow 0$, the function $J_1(\eta, \tau)$ has the following behavior:

$$J_1(\eta, \tau) = \sqrt{\frac{\pi}{-\tau}} + C_0^{\text{1D}}(\eta) + C_1^{\text{1D}}(\eta)\tau + O(\tau^2), \quad (62)$$

where

$$C_0^{\text{1D}}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u+4\eta}} \left[\frac{1}{\left(\frac{1+\eta}{1-\eta} \right)^2 e^u - 1} - \frac{(1+\eta)^2}{4\eta + u} \right] - 4\sqrt{\eta} \quad (63)$$

and

$$C_1^{\text{1D}}(\eta) = -\frac{16}{3} \eta^{\frac{3}{2}} - 4(1+\eta)^2 \sqrt{\eta} + \int_0^{\infty} du \frac{\sqrt{u+4\eta}}{\left(\frac{1+\eta}{1-\eta} \right)^2 e^u - 1}. \quad (64)$$

When the reduced energy is a complex variable in the physical sheet, one can use a series representation for the function

$J_1(\eta, \tau)$:

$$J_1(\eta, \tau) = \sqrt{\frac{\pi}{-\tau}} \operatorname{erfc}(2\sqrt{-\eta\tau}) + 4\sqrt{\eta} + C_0^{1D}(\eta) - \frac{(1+\eta)^2}{\sqrt{\eta}} [e^{4\eta\tau} - 1] + \sqrt{\pi} \sum_{p=1}^{\infty} e^{4\eta p} \left(\frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^{2p} \times \left\{ \frac{\operatorname{erfc}[2\sqrt{\eta(p-\tau)}]}{\sqrt{p-\tau}} - \frac{\operatorname{erfc}(2\sqrt{\eta p})}{\sqrt{p}} \right\}. \quad (65)$$

B. Low-energy scattering and zero-range limit

As was done for the 2D atomic waveguide in Sec. IV B, we consider the relevance of the zero-range limit. For usual trapping frequencies, the typical radius of interatomic forces is negligible as compared to the transverse length a_{\perp} ($\epsilon \ll a_{\perp}$ or equivalently $\eta \ll 1$). Thus, one can use the zero-range limits of the parameters in Eq. (62):

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} C_0^{1D}(\eta) = \sqrt{\pi} \zeta(1/2); \quad \lim_{\eta \rightarrow 0} C_1^{1D}(\eta) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta(3/2), \quad (66)$$

where ζ is the Riemann zeta function.

In the low-energy regime where only few 1D continua are opened, the product $\eta\tau$ is small as compared to unity. In this regime, the function $J_1(\eta, \tau)$ can be approximated by its zero-range limit. From Eq. (65), one finds

$$J_1(0, \tau) = \sqrt{\pi} \left[\frac{1}{\sqrt{-\tau}} + \zeta\left(\frac{1}{2}\right) + \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{p-\tau}} - \frac{1}{\sqrt{p}} \right) \right], \quad (67)$$

so that $J_1(0, \tau) = \sqrt{\pi} \zeta_H(1/2, -\tau)$ where ζ_H is the Hurwitz zeta function. This coincides with the result obtained by using zero-range potential models [41].

C. Monomode regime

1. Scattering and resonance

The monomode regime occurs for $\hbar\omega_{\perp} \leq E_{\text{rel}} < 3\hbar\omega_{\perp}$. At large interatomic distances ($z \gg \epsilon, a_{\perp}$), the relative particle occupies only the lowest transverse mode ($n=0, m=0$) and one can define the 1D scattering amplitude f_{1D} from the behavior of the scattering wave function

$$\langle z, \mathbf{r}_{\perp} | \Psi_{\text{rel}}^{k_0, 0, 0} \rangle \sim \langle \mathbf{r}_{\perp} | 0, 0 \rangle [e^{ik_0 z} + f_{1D}(k_0) e^{ik_0 |z|}]. \quad (68)$$

Near the threshold of the propagating regime ($E_{\text{rel}} \sim \hbar\omega_{\perp}$), the scattering amplitude can be approximated at the effective range level:

$$f_{1D}(k_0) = -\frac{1}{1 + ik_0 a_{1D} - ik_0^3 R_{1D}^3}. \quad (69)$$

In Eq. (69), a_{1D} is the 1D scattering length and R_{1D} is the 1D effective range parameter. They are given by

$$a_{1D} = \frac{-a_{\perp}(a - a^{\text{TG}})}{2(a - a_1^{\text{div}})} \left[\frac{a_{\perp} a_1^{\text{div}} (1 + \eta)^2}{a_{\text{bg}}^2} + \frac{C_0^{1D}(\eta)}{\sqrt{\pi}} \right], \quad (70)$$

$$R_{1D}^3 = \frac{a_{\perp}^6 (1 + \eta)^2}{8R^* a_{\text{bg}}^2} \left(\frac{a/a_{\text{bg}} - 1}{a/a_1^{\text{div}} - 1} \right)^2 + \frac{C_1^{1D}(\eta) a_{\perp}^3}{8\sqrt{\pi}} + \frac{e^{-2\eta} a_{\perp}^2 \epsilon^2 (1 + \eta)^2}{4a_{\text{eff}}(\hbar\omega_{\perp})}, \quad (71)$$

where we have introduced the two parameters a_1^{div} and a^{TG} defined by

$$a_1^{\text{div}} = \frac{a_{\text{bg}}}{1 + \delta\mathcal{M}\Delta B/\hbar\omega_{\perp}}, \quad (72)$$

$$a^{\text{TG}} = \frac{a_{\perp}(R^* a_{\text{bg}} - a_{\perp}^2/2) + \frac{C_0^{1D}(\eta)}{(1+\eta)^2 \sqrt{\pi}} R^* a_{\text{bg}}^2}{R^* a_{\perp} + \frac{C_0^{1D}(\eta)}{(1+\eta)^2 \sqrt{\pi}} (R^* a_{\text{bg}} + a_{\perp}^2/2)}. \quad (73)$$

In the limit where $R^* \rightarrow 0$ and $\epsilon \rightarrow 0$, one finds from Eq. (70) the result of Ref. [4], i.e.,

$$a_{1D} \sim \frac{-a_{\perp}}{2} \left[\zeta\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{a_{\perp}}{a} \right]. \quad (74)$$

For a 3D scattering length such that $a = a_1^{\text{div}}$, the 1D scattering length a_{1D} diverges. The resonant condition in 1D, i.e., the regime where the scattering amplitude is maximum, occurs for $a = a^{\text{TG}}$ where $a_{1D} = 0$. In the many-boson problem, if one neglects the effective range term, the limit $a_{1D} \rightarrow 0^-$ gives the Tonks-Girardeau (TG) regime and the limit $a_{1D} \rightarrow 0^+$ gives the super Tonks-Girardeau (STG) regime [7,8].

2. 1D effective range model

Similarly to the 2D-ERM, one can define a 1D effective range model (1D-ERM) which is a zero-range potential approach which gives the exact expression of the scattering amplitude in Eq. (69). In the 1D-ERM, the strictly 1D wave function for the relative motion (denoted ψ_{1D}) depends only on the relative coordinate z and solves the free Schrödinger equation everywhere in the space excepted at the contact ($z=0$). We introduce the projection operator over even 1D wave functions, denoted by $\hat{\Pi}_s^{1D}$:

$$\langle z | \hat{\Pi}_s^{1D} | \psi_{1D} \rangle = \frac{\psi_{1D}(z) + \psi_{1D}(-z)}{2}. \quad (75)$$

In this approach, the interatomic forces are replaced by the following contact condition:

$$\lim_{z \rightarrow 0^+} (1 + a_{1D} \partial_z + R_{1D}^3 \partial_z^3) \langle z | \hat{\Pi}_s^{1D} | \Psi \rangle = 0. \quad (76)$$

The 1D-ERM generalizes the contact condition of the 1D Wigner-Bethe-Peierls (1D-WBP) model where $R_{1D} = 0$ which defines the interaction in the Lieb-Liniger model of the 1D Bose gas [42].

VI. BOUND STATES IN ATOMIC WAVEGUIDES

A. Effect of confinement

We now consider the consequence of the transverse confinement on the properties of the dimers. The two main results of this part are as follows: (i) the threshold where the FD

appears is shifted at a magnetic field B_0^D :

$$B_0^D = B_0 + \Delta B + \frac{\hbar\omega_\perp}{D\delta\mathcal{M}}; \quad (77)$$

(ii) a background dimer is induced by the confinement for negative values of the background scattering length. When the domain of existence of the FD (or BD) is extended as a consequence of the confinement, we introduce the notion of confinement-induced Feshbach dimer (CIFD) [or of confinement-induced background dimer (CIBD)].

In presence of a transverse harmonic trap, the energy of a bound state is below the threshold of the first continuum, i.e., $E < \frac{\hbar\omega_\perp}{D}$, where $D = 2$ in a 2D atomic waveguide and $D = 1$ for a 1D atomic waveguide. In what follows, we use the reduced energy τ defined in Eq. (27) with $\lambda = E$. For the dimers, the reduced energy is thus negative. We also define the binding energy of a bound state E_{dim} in a D -dimensional waveguide with respect to the threshold of the monomode regime:

$$E_{\text{dim}} = E - \frac{\hbar\omega_\perp}{D}. \quad (78)$$

The spectrum of the dimers is given by the poles of the transition matrix in Eq. (32) or (58) which verify

$$\left(2\tau + \frac{1}{D}\right) + \frac{\delta\mathcal{M}\Delta B}{\hbar\omega_\perp} \frac{\mathcal{F}_D(\eta, \tau)}{\mathcal{F}_D(\eta, \tau) - 1} = \frac{\delta\mathcal{M}(B - B_0)}{\hbar\omega_\perp}, \quad (79)$$

where

$$\mathcal{F}_D(\eta, \tau) = \frac{-a_{\text{bg}}e^{-4\eta\tau}J_D(\eta, \tau)}{a_\perp\sqrt{\pi}(1 + \eta)^{3-D}}. \quad (80)$$

The left-hand of Eq. (79) is an increasing function of τ which varies from $-\infty$ for $\tau \rightarrow -\infty$ to $(\frac{1}{D} + \frac{\delta\mathcal{M}\Delta B}{\hbar\omega_\perp})$ for $\tau \rightarrow 0^-$. This last limit gives the threshold in Eq. (77) at which the CIFD appears. For $0 < a_{\text{bg}} < \epsilon\sqrt{\frac{\pi}{2}}$, it is a continuous function in the interval $\tau \in]-\infty, 0[$ and Eq. (79) admits thus at most one solution. In the other cases, the left-hand side of Eq. (79) diverges for a given negative value of the reduced energy τ . As a consequence, depending on the value of a_{bg} and of the detuning $\delta\mathcal{M}(B - B_0)$, there are one or two dimers. The behavior of the left-hand side of Eq. (79) in this last regime

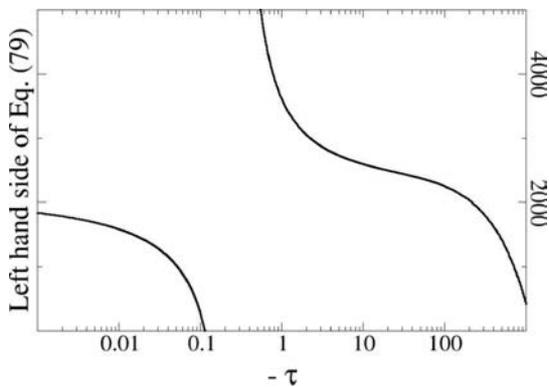


FIG. 1. Left-hand side of Eq. (79), in a 2D atomic waveguide, using the parameters of the Cs FR from Table II and $a_\perp = 1000a_0$.

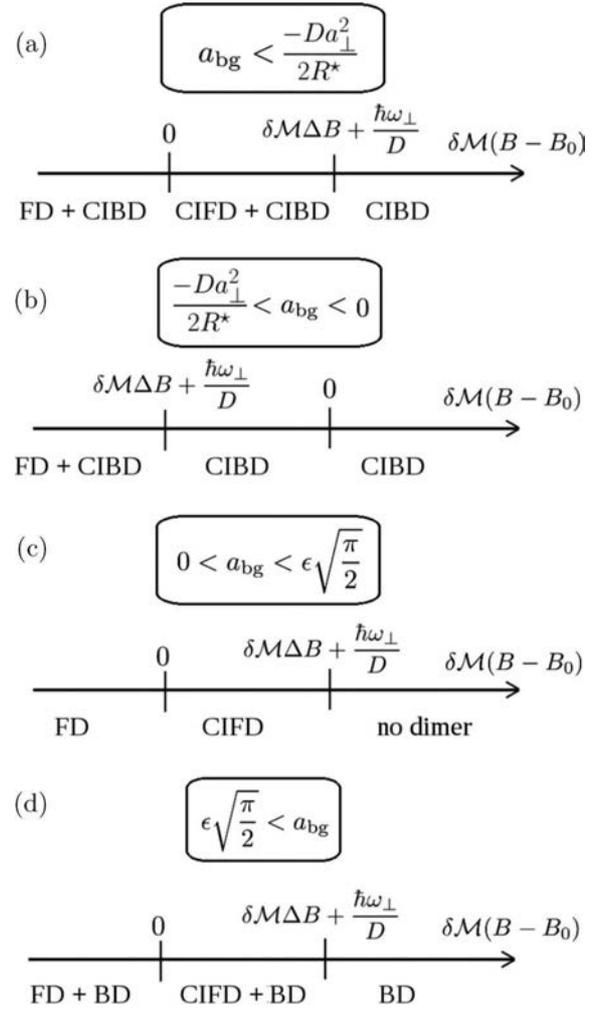


FIG. 2. Number and nature of dimers in reduced dimension depending on the value of a_{bg} and of the detuning $\delta\mathcal{M}(B - B_0)$. The Feshbach dimer (FD) and background dimer (BD) denote dimers that exist in the free space (see Table I). In situations where the transverse trap extends the domain of existence of the FD (or BD) dimer, we have introduced the notion of confinement-induced Feshbach dimer (CIFD) [or confinement-induced background dimer (CIBD)]. In the case (b), the domain of existence of the FD is reduced as compared to the 3D case.

is illustrated in Fig. 1 using the example of the Cs FR in Table II. We have summarized the domain of existence of the dimers in Fig. 2. For standard FR studied experimentally, the ratio $|\delta\mathcal{M}\Delta B|/\hbar\omega_\perp = a_\perp^2/(2R^*|a_{\text{bg}}|)$ is very large and $|\delta\mathcal{M}\Delta B| > \hbar\omega_\perp/D$. Consequently, $\delta\mathcal{M}\Delta B + \hbar\omega_\perp/D$ has the same sign as a_{bg} [see Eq. (18)]. However, for ultranarrow resonances where the ratio $|\delta\mathcal{M}\Delta B|/\hbar\omega_\perp$ is very small, $\delta\mathcal{M}\Delta B + \hbar\omega_\perp/D$ is thus positive. In this particular case, the domain of existence of the dimers is thus modified with respect to standard FR for $a_{\text{bg}} < 0$: there is still a CIBD whatever the value of the energy detuning, but also a CIFD exists in the interval $0 < \delta\mathcal{M}(B - B_0) < \delta\mathcal{M}\Delta B + \hbar\omega_\perp/D$ [case (a) of Fig. 2].

In the limit of large reduced binding energies, one recovers the expected 3D result of Eq. (23).

B. Shallow bound states and zero-range approach

The bound states can be considered shallow in the atomic waveguides for small reduced binding energies $|\tau| \ll 1$. Consequently, they can be studied in the monomode regime by using zero-range models.

1. 2D geometry

In the 2D geometry, the scattering length a_{2D} is always positive and thus the 2D-WBP model admits always one single bound state of binding energy $E_{\text{dim}} = E_{D=2}^{\text{WBP}}$ with

$$E_2^{\text{WBP}} = -\frac{2\hbar^2 e^{-2\gamma}}{\mu a_{2D}^2}. \quad (81)$$

Equation (81) can be generalized by considering an energy-dependent 2D scattering length $a_2(E_{\text{rel}})$ [43]. This last approach considered with $a_2(E_{\text{rel}}) = a_{2D} \exp(-2\mu a_{2D} R_{2D} E_{\text{rel}}/\hbar^2)$ is equivalent to the 2D-ERM and the binding energy E_{dim} of the 2D bound state is then found by solving

$$\ln\left(\frac{E_{\text{dim}}}{E_2^{\text{WBP}}}\right) = \frac{-8R_{2D}e^{-2\gamma}}{a_{2D}} \frac{E_{\text{dim}}}{E_2^{\text{WBP}}}. \quad (82)$$

In Eqs. (81) and (82), $|E_{\text{dim}}| \ll \hbar\omega_{\perp}$ for large values of the 2D scattering length ($a_{2D} \gg a_{\perp}$), i.e., in the resonant regime, as is the case for example near the threshold of appearance of the CIFD.

Examples of binding energies for different FR of Table II are plotted in Fig. 3 using the two-channel model, the WBP model, and the 2D-ERM. We have chosen a common transverse length ($a_{\perp} = 1000a_0$) for all species. The Cs resonance has been intensively studied in the group of Innsbruck and has been used for the first achievement of 2D BEC with ultracold atoms [44]. It illustrates a FR in the vicinity of a shape resonance ($|a_{\text{bg}}| \gg \epsilon$) with a shallow background dimer in the 3D free space. The FR chosen for ^{39}K illustrates a narrow FR ($R^* \gg |a_{\text{bg}}|$) and for ^7Li it illustrates a standard broad FR. In these last two examples, the background scattering length is negative, and there is thus a CIBD. Moreover, the scattering length is small compared to the transverse length, and in a large interval of detuning the ratio $a_{\perp}/a_{\text{eff}}(\hbar\omega_{\perp}/2) \sim a_{\perp}/a_{\text{bg}}$ is large and negative and the 2D scattering length in Eq. (49) is thus extremely large due to the exponential law. Consequently, in a large interval of detuning, the CIBD is an ultrashallow bound state with $|E_{\text{dim}}| \ll \hbar\omega_{\perp}$. The three resonances admit one or two bound states depending on the detuning.

2. 1D geometry

The 1D-WBP model supports one bound state iff the 1D scattering length is positive $a_{1D} > 0$ with the binding energy $E_{\text{dim}} = E_{D=1}^{\text{WBP}}$:

$$E_1^{\text{WBP}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_{1D}^2}. \quad (83)$$

Referring to the usual pairwise pseudopotential $g_{\text{eff}}\delta(z)$ used in 1D systems, one has $g_{\text{eff}} = -\hbar^2/(\mu a_{1D})$ and Eq. (83) is thus relevant in the regime of small and attractive effective interaction ($g_{\text{eff}} \rightarrow 0^-$). The 1D-ERM allows zero, one, or two bound states, depending on the values of the parameters R_{1D}

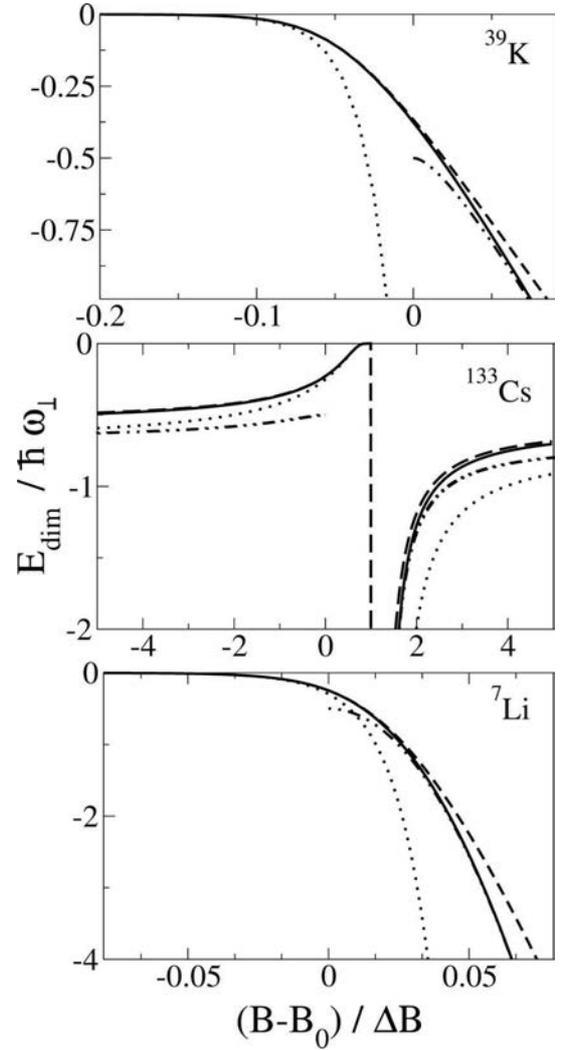


FIG. 3. Spectrum of quasi-2D dimers for three FR of Table II with $a_{\perp} = 1000a_0$. Solid line: two-channel model; dotted line: 2D-WBP model; dashed line: 2D-ERM; double dotted dashed line: 3D spectrum. For ^{39}K and ^7Li , only one dimer branch can be seen. The other branch is very close to zero and exists for $(B - B_0)/\Delta B \gtrsim 1$. When $\delta\mathcal{M}(B - B_0)$ tends to $\delta\mathcal{M}\Delta B + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{D}$ by positive values, the two-dimensional scattering length tends to zero and there is no shallow dimer in the two-channel model. Nevertheless, in this regime the quasivertical dashed line in the Cs case illustrates the fact that the 2D-ERM predicts a spurious dimer in a tiny interval of the relative detuning.

and a_{1D} . The binding energies $E_{\text{dim}} = -\hbar^2 q^2/(2\mu)$ are given by the positive roots of the equation

$$1 - a_{1D}q - R_{1D}q^3 = 0. \quad (84)$$

We plotted in Fig. 4 the binding energies in the 1D atomic waveguide for three different resonances of Table II and $a_{\perp} = 1000a_0$. This figure permits us to compare the binding energy of shallow dimers obtained from the two-channel model, the 1D-WBP model, and the 1D-ERM. In the 1D resonant regime where the 1D scattering length tends to zero, the WBP model cannot describe a possible shallow dimer

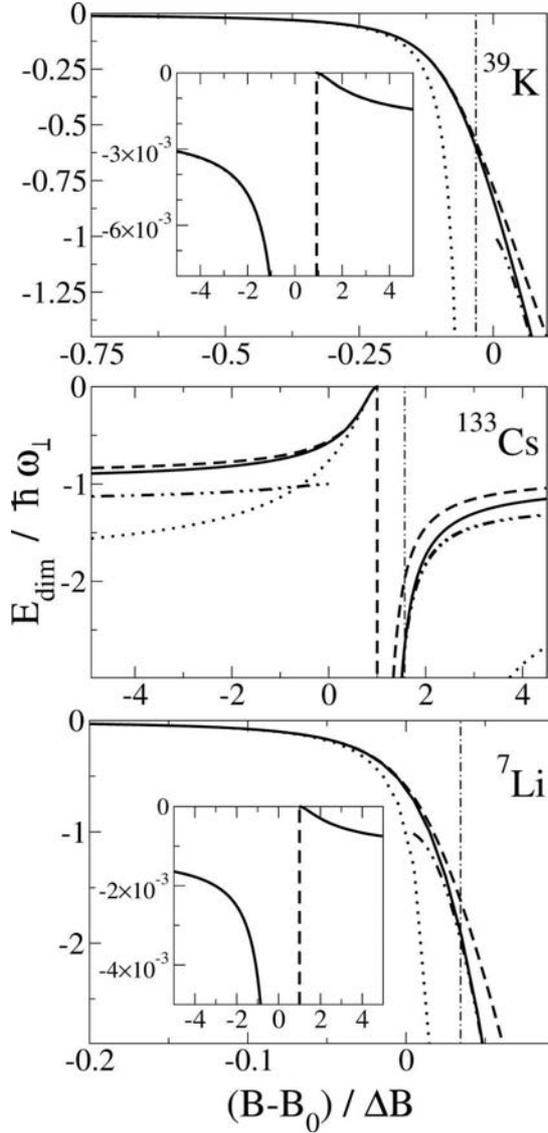


FIG. 4. Spectrum of quasi-1D dimers for three FR of Table II with $a_{\perp} = 1000a_0$. Solid line: two-channel model; dotted line: 1D-WBP model; dashed line: 1D-ERM; double dotted dashed line: 3D spectrum. In the insets, the low-dimensional predictions are too close to be distinguished. The vertical dashed-dotted lines indicate the detuning where the 1D resonance ($a_{1D} = 0$) occurs. As in the 2D case, in a tiny interval of the relative detuning where $\delta\mathcal{M}(B - B_0)$ tends to $\delta\mathcal{M}\Delta B + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{D}$ by positive values, the quasivertical dashed lines illustrate the fact the 1D-ERM predicts the existence of a spurious dimer branch.

whereas the 1D-ERM can give a quantitative approximation (see Fig. 4).

C. Relevance of the effective range approximation in low dimensions

We first investigate the regime where the effective range term gives a perturbative contribution to the bound-state energy in the monomode regime for $D = 1$ or 2 :

$E_{\text{dim}} = E_D^{\text{WBP}} + \delta E_D$. Linearizing Eqs. (84) and (82), in the regime of large and positive value of a_{1D}/R_{1D} or a_{2D}/R_{2D} , one finds

$$\frac{\delta E_{D=1}}{E_{D=1}^{\text{WBP}}} = -\frac{2}{3 + \left(\frac{a_{1D}}{R_{1D}}\right)^3}, \quad (85)$$

$$\frac{\delta E_{D=2}}{E_{D=2}^{\text{WBP}}} = -\frac{1}{1 + \frac{e^{2\gamma}}{8} \left(\frac{a_{2D}}{R_{2D}}\right)}. \quad (86)$$

When the detuning $\delta\mathcal{M}(B - B_0)$ tends to $\delta\mathcal{M}\Delta B + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{D}$ by positive values, for $D = 2$, a_{2D} tends to zero, whereas for $D = 1$, a_{1D} tends to minus infinity. In this regime, no shallow dimer exists in the two-channel model and in the WBP model. Nevertheless, the ERM predicts a spurious binding energy in a narrow interval of the relative magnetic detuning. This can be seen in Figs. 3 and 4 by the existence of a quasivertical dashed line in the spectrum. Interestingly, as a consequence of the nontrivial dependence of the effective range parameters R_{1D} and R_{2D} as a function of R^* , the 1D-ERM and 2D-ERM are much more predictive than the WBP models for binding energies of the shallow 1D bound states even for broad FR where the 3D effective range parameter is small (for instance, for the Cs FR in Figs. 3 and 4). Moreover, the 1D-ERM and 2D-ERM provide still quantitative results for binding energies of the order of the trapping energy $\hbar\omega_{\perp}$.

We now identify in the 1D atomic waveguide a new regime where the effective range approximation is relevant nonperturbatively. This happens in the resonant limit, i.e., for $a \sim a^{\text{TG}}$ where $a_{1D} \rightarrow 0$ and for a large effective range parameter R_{1D} :

$$R_{1D} \gg a_{\perp} \quad \text{and} \quad |a_{1D}| \ll a_{\perp}. \quad (87)$$

When Eq. (87) is satisfied, the effective range term can be anomalously large with $k|a_{1D}| \ll (k|R_{1D}|)^3$ in the monomode regime and for small relative momentum ($k \ll 1/a_{\perp}$) (typically for $k \sim 1/R_{1D}$). In the strict resonant limit ($a_{1D} = 0$) and for positive value of R_{1D} , there is a shallow dimer of binding energy $\hbar^2/(2\mu R_{1D}^2)$. This is in strong contrast with the result of the WBP model where the dimer is infinitely bound in the STG limit ($a_{1D} \rightarrow 0^+$) and does not exist in the TG limit ($a_{1D} \rightarrow 0^-$). Equation (87) defines a regime which has not yet been explored at the many-body level. In this context, it is interesting to address more closely the validity of the effective range approximation for the binding energy $|k| \sim 1/R_{1D}$. For this purpose, one evaluates the ratio between the effective range term in the denominator in Eq. (68) and the next term in the low-energy expansion obtained from Eq. (58) at $k = i/R_{1D}$ and $a = a^{\text{TG}}$. For $\eta \ll 1$, one finds the following criterion:

$$\left| \frac{a_{\text{bg}}}{a_{\perp}} \left[\frac{R^*}{a_{\perp} + a_{\text{bg}}\zeta(1/2)} \right]^{1/3} \right| \ll 1. \quad (88)$$

Moreover, in view of a future achievement of this regime, it is essential to know the necessary conditions to reach large values of the ratio R^*/a_{\perp} . In the TG regime [where the second condition in Eq. (87) is satisfied] and neglecting η , Eq. (71) gives

$$\left(\frac{R_{1D}}{a_{\perp}} \right)_{a=a^{\text{TG}}}^3 \simeq \frac{R^*}{2a_{\perp}} \left[1 + \zeta(1/2) \frac{a_{\text{bg}}}{a_{\perp}} \right]^2. \quad (89)$$

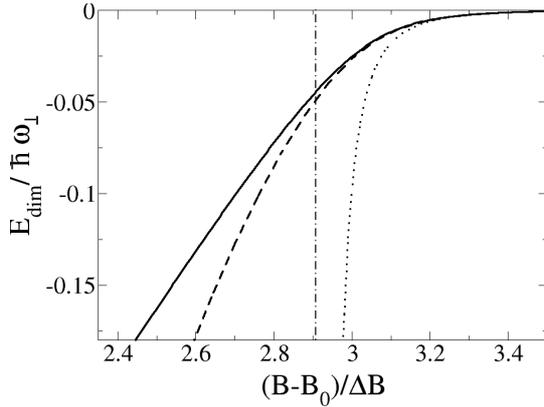


FIG. 5. Energies of the dimer as a function of the reduced detuning in the 1D monomode regime ($a_{\perp} = 3000a_0$) for the FR of ^{23}Na at $B_0 = 853$ G (see Table II). Solid line: two-channel model; dotted line: 1D-WBP model; dashed line: 1D-ERM. The vertical dashed-dotted line indicates the detuning where the 1D resonance ($a_{1D} = 0$) occurs.

Hence, the first condition in Eq. (87) can be satisfied for large enough values of the ratio R^*/a_{\perp} . However, this ratio cannot be too large in order to satisfy Eq. (88).

Hopefully, species which verify the two conditions in Eqs. (87) and (88) can be found. One example is given by ^{23}Na near the narrow FR at 853 G with a realistic axial confinement with $a_{\perp} = 3000a_0$ (see Table II). At resonance $a_{1D} = 0$, one finds $R_{1D}/a_{\perp} \sim 3.2$ and the value of the left-hand side of the criterion in Eq. (88) is about (0.087). The binding energy is plotted as a function of relative detuning in Fig. 5. Close to the resonance, the dimer is shallow and this plot illustrates the breakdown of the WBP model in this regime. As expected, the ERM model gives a quantitatively good approximation of the binding energy.

D. Occupation probability of the closed channel

The mean number of molecules in the closed channel highlights the crossover between the different types of dimers. It is equal here to the occupation probability of the molecular state $\langle \Psi^m | \Psi^m \rangle = \frac{dE}{dB} / \delta \mathcal{M}$ [32]. In the off-resonant regime, for the BD the occupation probability in the closed channel vanishes, whereas for the FD it tends to unity (for large detunings and thus large binding energies, the FD populates mainly the molecular state).

We plotted the occupation probability in the closed channel in Fig. 6 for the two bound states in a 1D atomic waveguide for the ^{133}Cs FR at $B_0 = -11.7$ G with a transverse length $a_{\perp} = 1000a_0$. In this example, the background scattering length a_{bg} is positive and larger than $\epsilon\sqrt{\frac{\pi}{2}}$: this resonance corresponds to Fig. 2(d). The figure illustrates the crossover between the CIFD and the BD [Fig. 6(a)] and the BD and the FD [Fig. 6(b)]. At the threshold where the CIFD appears, the occupation probability in the closed channel is small. In the off-resonant regime, the BD has also a vanishingly small occupation probability in the closed channel. Conversely, for large and negative magnetic detuning, the FD occupies mainly the closed channel as expected from Eq. (23).

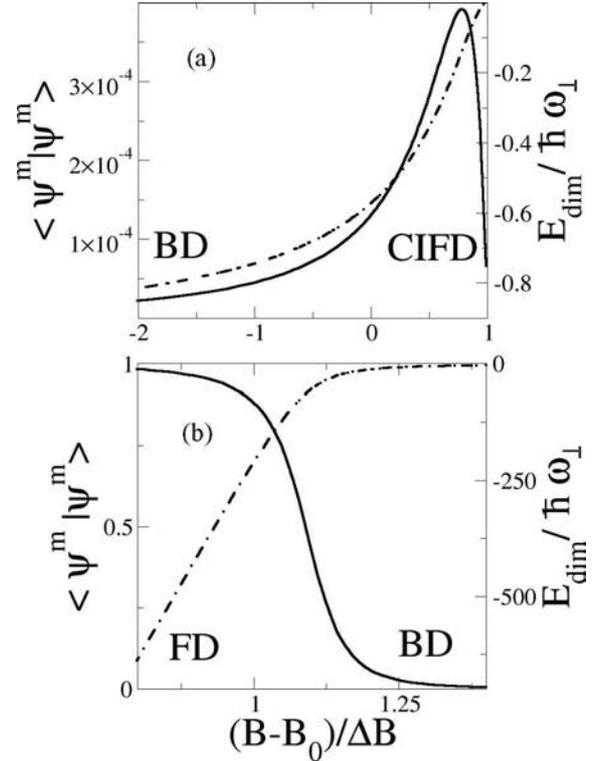


FIG. 6. Dashed-dotted lines: binding energy for dimers in a 1D atomic waveguide ($a_{\perp} = 1000a_0$) for the ^{133}Cs FR in Table II; solid lines: occupation probability of the closed channel for the corresponding dimer. (a) Results for the dimers of the upper branch in the spectrum; (b) results for the lower branch.

VII. CONCLUSIONS

In this paper, we use a finite-range two-channel model to solve the two-body problem for atoms in a 1D and a 2D atomic waveguide. The model which was already used in Refs. [28–32] gives quantitative results in a large interval of magnetic detuning and colliding energies and permits us to derive analytical expressions for two-body scattering in low dimensions. The model gives substantial improvement with respect to the pure WBP models of the interaction [45]. We compare the results of the two-channel model with purely 2D (or 1D) zero-range models (WBP models and effective range models), and give conditions where these approaches are relevant. The effective range model is shown to be a quantitative approach in a large interval of magnetic detuning. For 1D atomic waveguides, we identify a regime of scattering resonance (the 1D scattering length tends to zero) where the effective range term is dominant in the 1D scattering amplitude. We exhibit a possible achievement of this regime by using a narrow FR of ^{23}Na atoms. In this regime, contrary to the standard 1D resonant regime, a shallow dimer exists. The consequences of these findings at the few- and many-body levels are an open issue. One expects large deviations from the TG and STG properties as for instance the nature ground state [46,47] as a function of the effective range parameter.

ACKNOWLEDGMENT

The Cold Atoms group of LPTMC is associated with Institut Francilien de Recherche sur les Atomes Froids.

APPENDIX: A USEFUL EXPRESSION

In this Appendix, we give an analytical expression for the infinite sum

$$S_\eta(u) = \sum_{n=0}^{\infty} |(\delta_\epsilon^{\text{1D}}|n\rangle|^2 e^{-nu/2}. \quad (\text{A1})$$

Formally, one recognizes in Eq. (A1) the density operator $\hat{\rho}$, of the harmonic oscillator in the x direction, considered in the representation $|n\rangle$ at a temperature $k_B T = 2\hbar\omega_\perp/u$:

$$S_\eta(u) = \langle \delta_\epsilon^{\text{1D}} | \hat{\rho} | \delta_\epsilon^{\text{1D}} \rangle e^{u/4}. \quad (\text{A2})$$

We perform the calculation in the configuration space, where the density matrix $\rho(x, x') \equiv \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle$ is

$$\rho(x, x') = \langle x | \exp \left[- \left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2} \omega_\perp^2 \hat{x}^2 \right) \frac{u}{2\hbar\omega_\perp} \right] | x' \rangle. \quad (\text{A3})$$

One can then use the known result for the density matrix

$$\rho(x, x') = \frac{\exp \left\{ - \frac{[\cosh(\frac{u}{2})(x^2 + x'^2) - 2xx']}{2a_\perp^2 \sinh(\frac{u}{2})} \right\}}{a_\perp \sqrt{2\pi \sinh(\frac{u}{2})}} \quad (\text{A4})$$

together with the expression of $\langle x | \delta_\epsilon^{\text{1D}} \rangle$ in Eq. (31). The integration over x and x' implies only Gaussian functions and one finds

$$S_\eta(u) = \frac{1}{a_\perp \sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{(1+\eta)^2 - e^{-u}(1-\eta)^2}}. \quad (\text{A5})$$

-
- [1] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).
- [2] *Proceedings of the School Quantum Gases in Low Dimensions* (EDP Sciences, Les Ulis-France, 2004).
- [3] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).
- [4] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998).
- [5] D. S. Petrov, M. Holzmann, and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2551 (2000).
- [6] E. Haller, M. J. Mark, R. Hart, J. G. Danzl, L. Reichsöllner, V. S. Melezhik, P. Schmelcher, and H.-C. Nägerl, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 153203 (2010).
- [7] M. Girardeau, *J. Math. Phys.* **1**, 516 (1960).
- [8] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, and S. Giorgini, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 190407 (2005).
- [9] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, *Science* **305**, 1125 (2004).
- [10] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and Immanuel Bloch, *Nature (London)* **429**, 277 (2004).
- [11] E. Haller, M. Gustavsson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, and H.-C. Nägerl, *Science* **325**, 1224 (2009).
- [12] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, and J. B. Dalibard, *Nature (London)* **441**, 1118 (2006).
- [13] Z. Hadzibabic and J. Dalibard, in *40 Years of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Theory*, edited by Jorge V. José (World Scientific, Singapore, 2013), pp. 297–323.
- [14] C. Mora, R. Egger, and A. O. Gogolin, *Phys. Rev. A* **71**, 052705 (2005).
- [15] J. Levinsen, P. Massignan, and M. M. Parish, *Phys. Rev. X* **4**, 031020 (2014).
- [16] M. Holzmann and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 190402 (2008).
- [17] T. Plisson, B. Allard, M. Holzmann, G. Salomon, A. Aspect, P. Bouyer, and T. Bourdel, *Phys. Rev. A* **84**, 061606(R) (2011).
- [18] D. S. Petrov and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* **64**, 012706 (2001).
- [19] V. A. Yurovsky, *Phys. Rev. A* **71**, 012709 (2005).
- [20] J. I. Kim, J. Schmiedmayer, and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **72**, 042711 (2005).
- [21] Z. Idziaszek and T. Calarco, *Phys. Rev. A* **74**, 022712 (2006).
- [22] P. Naidon, E. Tiesinga, W. F. Mitchell, and P. S. Julienne, *New J. Phys.* **9**, 19 (2007).
- [23] L. Pricoupenko, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 170404 (2008).
- [24] S. Saeidian, V. S. Melezhik, and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **77**, 042721 (2008).
- [25] V. S. Melezhik and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **84**, 042712 (2011).
- [26] S. Saeidian, V. S. Melezhik, and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **86**, 062713 (2012).
- [27] M. Holland, S. J. J. M. F. Kokkelmans, M. L. Chiofalo, and R. Walser, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 120406 (2001).
- [28] M. Jona-Lasinio and L. Pricoupenko, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 023201 (2010).
- [29] C. Mora, Y. Castin, and L. Pricoupenko, *C. R. Phys.* **12**, 71 (2011).
- [30] L. Pricoupenko and M. Jona-Lasinio, *Phys. Rev. A* **84**, 062712 (2011).
- [31] C. Trefzger and Y. Castin, *Phys. Rev. A* **85**, 053612 (2012).
- [32] F. Werner, L. Tarruell, and Y. Castin, *Eur. Phys. J. B* **68**, 401 (2009).
- [33] B. Marcellis, E. G. M. van Kempen, B. J. Verhaar, and S. J. J. M. F. Kokkelmans, *Phys. Rev. A* **70**, 012701 (2004).
- [34] D. S. Petrov, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 143201 (2004).
- [35] A. O. Gogolin, C. Mora, and R. Egger, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 140404 (2008).
- [36] L. Pricoupenko, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 180402 (2013).
- [37] The coupling factor Λ in this paper differs by a factor $\sqrt{2}$ from the one in Refs. [28,30]. The other parameters are $g = g_0$, $\delta\mathcal{M} = \delta\mu$, and $\epsilon = b\sqrt{2}$.
- [38] C. D'Errico, M. Zaccanti, M. Fattori, G. Roati, M. Inguscio, G. Modugno, and A. Simoni, *New J. Phys.* **9**, 223 (2007).

- [39] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Plots, and Mathematical Tables* (Dover, New York, 1970).
- [40] L. Schwartz, *Théorie des Distributions* (Hermann, Paris, 1978).
- [41] T. Bergeman, M. G. Moore, and M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **91**, 163201 (2003).
- [42] E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).
- [43] K. Kanjilal and D. Blume, Phys. Rev. A **73**, 060701 (2006).
- [44] D. Rychtarik, B. Engeser, H.-C. Nägerl, and R. Grimm, Phys. Rev. Lett. **92**, 173003 (2004).
- [45] L. Pricoupenko, Phys. Rev. A **83**, 062711 (2011).
- [46] J. B. McGuire, J. Math. Phys. **5**, 622 (1964).
- [47] Y. Castin, Eur. Phys. J. B **68**, 317 (2009).

Chapitre 4

Portée effective unidimensionnelle et écart à l'intégrabilité

4.1 Introduction

Particularité des systèmes de dimension réduite. En physique classique, les systèmes uni- et bidimensionnels présentent certaines propriétés très spécifiques par rapport aux systèmes tridimensionnels [89]. Par exemple, dans un problème de marche aléatoire où une particule se déplace sur un réseau uni- ou bidimensionnel, la particule est certaine de repasser au bout d'un temps fini par son point de départ. Ce résultat est très différent si la particule peut se mouvoir sur un réseau tridimensionnel où, dans ce cas, la probabilité qu'elle retourne à son point de départ est de l'ordre de 0.34, soit une probabilité bien inférieure à l'unité [90, 91, 92].

En ce qui concerne les atomes froids, la question de la dimensionnalité de l'espace accessible pour un gaz atomique est également très importante. L'un des exemples les plus connus à ce sujet concerne l'existence d'un condensat de Bose-Einstein en dimension réduite. Contrairement à un gaz bosonique tridimensionnel, un gaz uni- ou bidimensionnel homogène ne peut pas condenser à température non nulle. Ceci a été formulé par Bogolioubov avec le théorème k^{-2} [93, 94, 1] et peut être vu comme une conséquence de la forme de la densité d'état. Dans le formalisme grand canonique [95], le nombre moyen de particules N est donné par la distribution de Bose-Einstein quelle que soit la dimension du système :

$$N = \sum_{\nu} \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{\nu}-\mu}{k_B T}\right) - 1}, \quad (4.1.1)$$

où la somme porte sur l'ensemble des états propres noté $\{\nu\}$. Le potentiel chimique μ peut prendre toutes les valeurs entre $-\infty$ et 0 afin que l'état fondamental ν_0 d'énergie $E_{\nu_0} = 0$ ait une population positive. Le nombre de particules N' dans un état excité est alors borné supérieurement :

$$N' = \sum_{\nu \neq \nu_0} \frac{1}{e^{\beta(E_{\nu}-\mu)} - 1} < N'_{\max} = \sum_{\nu \neq \nu_0} \frac{1}{e^{\beta E_{\nu}} - 1}. \quad (4.1.2)$$

Lorsque N'_{\max}/L^D reste fini à la limite thermodynamique, la densité de particules dans les modes excités peut saturer et le système peut donc condenser pour une densité dans l'espace des phases au-dessus d'une certaine valeur critique. Ce sera le cas lorsque l'intégrale suivante existe :

$$\int_0^\infty dE \frac{\rho(E)}{e^{\beta E} - 1}, \quad (4.1.3)$$

où $\rho(E)$ est la densité d'état du système. Dans l'espace libre, la densité d'état varie selon la dimension du système D :

$$\rho(E) \propto E^{(\frac{D}{2}-1)}. \quad (4.1.4)$$

Le système ne peut donc condenser dans l'espace libre à température non nulle que si $D > 2$.

Par ailleurs, certaines phases corrélées en dimension réduite n'ont pas d'équivalent dans l'espace tridimensionnel usuel. C'est par exemple le cas des gouttelettes bosoniques bidimensionnelles pour une interaction attractive [96] ou pour les gaz de Tonks-Girardeau et de super Tonks-Girardeau qui existent au voisinage d'une résonance de diffusion unidimensionnelle.

De plus, il existe des méthodes théoriques développées spécifiquement pour les systèmes unidimensionnels qui permettent d'obtenir des résultats exacts pour le problème à N corps. Un exemple qui sera très présent dans ce chapitre est l'ansatz de Bethe qui s'applique pour des systèmes intégrables, et dont quelques caractéristiques sont rappelées dans l'annexe 4.A. Enfin, dans certaines configurations, le théorème de Girardeau [10] permet de mettre en correspondance un système bosonique en forte interaction répulsive avec un système fermionique sans interaction, ce qui permet d'obtenir des résultats exacts pour le problème à N bosons.

Intégrabilité. L'intégrabilité est une propriété particulière de certains systèmes dynamiques. En mécanique classique, un système est intégrable s'il possède autant de constantes du mouvement indépendantes et en involution que de degrés de liberté. Pour un système quantique, l'intégrabilité est liée au fait que l'ansatz de Bethe soit solution du problème à N corps [97, 98]. Dans ces deux cas, le système ne pourra pas se thermaliser.

C'est par exemple le cas pour un système de deux atomes identiques dans un espace unidimensionnel, où la conservation de l'impulsion totale ainsi que de l'énergie impose que l'ensemble des deux impulsions des deux atomes soit conservé après la collision – soit chaque particule conserve son impulsion, soit les deux atomes échangent leurs impulsions.

Pour un système quantique d'au moins trois particules, les propriétés d'intégrabilité dépendent des interactions. Elles ont été étudiées en détail, aussi bien d'un point de vue physique que mathématique, et les problématiques actuelles concernent les écarts à l'intégrabilité, ainsi que les propriétés de thermalisation [99, 22] ou de réactivité chimique [100, 101] qui en découlent. En particulier, l'intégrabilité étant une caractéristique des systèmes unidimensionnels, il est possible d'étudier la transition d'un système non intégrable vers un système intégrable en étudiant la transition d'un système tridimensionnel vers un système unidimensionnel [23].

4.2 Diffusion unidimensionnelle

4.2.1 Généralités

Considérons la diffusion unidimensionnelle de deux atomes de masse réduite μ où le potentiel d'interaction $V(z)$ possède une distance caractéristique l_{1D} [on considère donc que $V(|z| \gg l_{1D}) = 0$]. L'équation de Schrödinger stationnaire de la fonction d'onde relative $\psi(z)$ de ce problème à deux corps est alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dz^2} + V(z)\psi = E\psi. \quad (4.2.1)$$

Loin du cœur de l'interaction et en définissant le nombre d'onde positif $k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$, les fonctions d'onde des états de diffusion s'écrivent sous la forme [16, 42] :

$$\psi(z) \simeq \begin{cases} e^{ikz} + f_0 e^{-ikz} - f_1 e^{-ikz}, & z \ll -l_{1D} \\ e^{ikz} + f_0 e^{ikz} + f_1 e^{ikz}, & z \gg l_{1D}, \end{cases} \quad (4.2.2)$$

où f_0 et f_1 sont les amplitudes de diffusion du problème pour les parties paire et impaire de la fonction d'onde ; ces amplitudes dépendent bien entendu du nombre d'onde k . L'amplitude de diffusion du secteur pair est exactement l'amplitude de diffusion défini dans l'équation (3.1.2). De plus, cette forme asymptotique de la fonction d'onde peut également se présenter comme un problème de transmission et de réflexion à travers une barrière :

$$\psi(z) \simeq \begin{cases} e^{ikz} + r e^{-ikz}, & z \ll -l_{1D} \\ t e^{ikz}, & z \gg l_{1D}. \end{cases} \quad (4.2.3)$$

Dans l'équation (4.2.3), les coefficients de transmission et de réflexion en amplitude sont notés t et r , et dépendent du nombre d'onde relatif k . On peut alors facilement relier les coefficients de transmission et de réflexion avec les amplitudes de diffusion :

$$r = f_0 - f_1 \quad ; \quad t = 1 + f_0 + f_1. \quad (4.2.4)$$

Lorsque la fonction d'onde est symétrique, la diffusion a lieu dans le secteur pair et seule l'amplitude de diffusion paire f_0 est importante. Si la fonction d'onde est antisymétrique, c'est la partie impaire qui diffuse et dans ce cas seule f_1 contient de l'information. La statistique bosonique impose que la diffusion de bosons identiques s'effectue dans le secteur pair. Au contraire, pour des fermions identiques totalement polarisés, la diffusion ne s'effectue que dans le secteur impair.

4.2.2 Modèles de portée effective

Il a été vu dans la partie 3.6.2 qu'un modèle de portée effective en secteur pair peut être implémenté *via* la condition de contact :

$$\lim_{z \rightarrow 0^+} \left(1 + a_0 \partial_z + R_0^3 \partial_z^3\right) \langle z | \hat{\Pi}_0 | \psi \rangle = 0 \quad ; \quad \langle z | \hat{\Pi}_0 | \psi \rangle = \frac{1}{2} [\psi(z) + \psi(-z)], \quad (4.2.5)$$

et que l'amplitude de diffusion d'une telle interaction s'écrit :

$$f_0(k) = \frac{-1}{1 + ia_0k - iR_0^3k^3}, \quad (4.2.6)$$

où l'indice 1D n'est plus explicité car on ne considère dans cette partie qu'un système unidimensionnel, mais où l'indice 0 a été ajouté afin de ne pas confondre les paramètres de la diffusion dans les secteurs pair et impair. Pour une interaction dans le secteur impair incluant le paramètre de portée effective R_1 , la condition de contact est quant à elle [88] :

$$\lim_{z \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{a_1} + \partial_z - R_1 \partial_z^2 \right) \langle z | \hat{\Pi}_1 | \psi \rangle = 0 \quad ; \quad \langle z | \hat{\Pi}_1 | \psi \rangle = \frac{1}{2} [\psi(z) - \psi(-z)], \quad (4.2.7)$$

et l'amplitude de diffusion associée s'écrit :

$$f_1(k) = \frac{-ik}{\frac{1}{a_1} + ik + R_1k^2}. \quad (4.2.8)$$

Les modèles de Wigner-Bethe-Peierls sont définis par les mêmes conditions de contact dans le cas particulier où la portée effective est strictement nulle, c'est-à-dire où $R_0 = 0$ pour le secteur pair et $R_1 = 0$ dans le secteur impair.

Dénomination. Le terme Wigner-Bethe-Peierls est utilisé ici par analogie avec une interaction tridimensionnelle. Lorsque l'on considère un ensemble unidimensionnel de N atomes diffusant dans le secteur pair et où la portée effective est négligée, on parle plutôt de modèle de Lieb-Liniger [20] lorsque $a_0 < 0$ et de modèle de McGuire [74] lorsque $a_0 > 0$. On rencontre parfois le terme de modèle de Lieb-Liniger-McGuire lorsque la longueur de diffusion n'a pas de signe prédéterminé. Pour le système équivalent en interaction dans le secteur impair on parle également de modèle de Cheon-Shigehara [102].

4.2.3 État lié à deux corps

Énergie. Que ce soit pour une interaction dans le secteur pair ou impair, nous nous restreignons au cas où la portée effective est positive [88, 39]. En effet, comme il a été vu précédemment, il n'existe expérimentalement pas de gaz unidimensionnel, mais seulement des gaz confinés dans des guides d'onde suffisamment étroits : les relations entre les propriétés des interactions et celles des guides d'onde imposent dans la majorité des configurations la positivité de la portée effective.

Dans ce cas, il existe un unique état lié à deux corps pour une interaction dans le secteur pair d'énergie quelle que soit la valeur de la longueur de diffusion a_0 :

$$E_0 = \frac{-\hbar^2 \kappa_0^2}{2\mu} \quad \text{avec} \quad 1 - \kappa_0 a_0 - R_0^3 \kappa_0^3 = 0, \quad (4.2.9)$$

et il existe un unique état lié dans le cas d'une interaction dans le secteur impair pour une longueur de diffusion positive $a_1 > 0$ d'énergie :

$$E_1 = \frac{-\hbar^2 \kappa_1^2}{2\mu} \quad \text{avec} \quad \kappa_1 = \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{4R_1}{a_1}}}{2R_1}. \quad (4.2.10)$$

Physiquement, ces dimères ne sont pertinents que si leur énergie de liaison est petite par rapport à l'énergie du premier état excité du guide d'onde.

Normalisation. Afin de normaliser l'état lié, on peut utiliser la relation de fermeture des états propres du système à deux corps suivant [61] en considérant successivement une interaction agissant uniquement dans le secteur pair ou dans le secteur impair¹ :

$$\int \frac{dk}{2\pi} |\psi_{\eta,k}\rangle \langle \psi_{\eta,k}| + |\phi_\eta\rangle \langle \phi_\eta| = \mathbb{1} \quad \text{avec} \quad \eta = 0 \text{ ou } 1. \quad (4.2.11)$$

L'entier η de l'équation (4.2.11) permet de choisir une diffusion dans le secteur pair pour $\eta = 0$, ou une diffusion dans le secteur impair avec $\eta = 1$. En particulier, les états de diffusions dans le secteur pair (resp. impair) sont notés $|\psi_{0,k}\rangle$ (resp. $|\psi_{1,k}\rangle$) et l'unique état lié est $|\phi_0\rangle$ (resp. $|\phi_1\rangle$). Dans l'espace des configurations ils ont la forme :

$$\langle z|\psi_{\eta,k}\rangle = e^{ikz} + [(-1)^\eta + 2\eta\Theta(z)] f_\eta(k) e^{ik|z|} \quad ; \quad \langle z|\phi_\eta\rangle = \mathcal{N} [(-1)^\eta + 2\eta\Theta(z)] e^{-\kappa_\eta|z|}. \quad (4.2.12)$$

La fonction de Heaviside est notée Θ dans l'équation (4.2.12) et par convention $\Theta(0) = \frac{1}{2}$. En utilisant la propriété des amplitudes de diffusion qui découle de l'unitarité du processus de diffusion [42] :

$$|f_\eta(k)|^2 = -\frac{1}{2} [f_\eta(k) + f_\eta^*(k)], \quad (4.2.13)$$

et en utilisant les équations (4.2.11) et (4.2.12), on montre que :

$$|\mathcal{N}|^2 = -\int \frac{dk}{2\pi} f_\eta(k). \quad (4.2.14)$$

Finalement, le facteur de normalisation de l'état lié est :

$$|\mathcal{N}| = \sqrt{\frac{\kappa_\eta}{1 + 2(R_\eta \kappa_\eta)^{3-2\eta}}}. \quad (4.2.15)$$

Dans le cas où la portée effective est négligeable, l'état lié est simplement normalisé à l'unité. Cependant, lorsque l'on prend en compte la portée effective, la normalisation de l'état lié devient non triviale. Ceci peut s'interpréter comme étant une conséquence de l'existence d'un couplage avec une voie fermée (cf partie 2.5).

4.2.4 Modèle de contact pour un système de N atomes

L'utilisation de ces modèles de contact (Lieb-Liniger-McGuire et portée effective) définis par les équations (4.2.6) (4.2.8) pour un système de N atomes est assez immédiate. Cependant, elle nécessite de préciser dans un premier temps certaines notations.

1. Dans le chapitre 5, l'indice η a une signification différente : il représente le type de particule considérée.

Notations. On note z_i la position de chaque particule i et l'ensemble des coordonnées des N particules est noté :

$$(z)_N = z_1, \dots, z_N. \quad (4.2.16)$$

Pour chaque paire de particules, on définit la coordonnée relative et la position du centre de masse :

$$z_{ij} = z_i - z_j \quad ; \quad Z_{ij} = \frac{z_i + z_j}{2}. \quad (4.2.17)$$

Les opérateurs de projection sur les secteurs pair et impair se généralisent en :

$$\begin{aligned} \langle (z)_N | \hat{\Pi}_\eta^{ij} | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \left[\langle z_1, \dots, z_i, \dots, z_j, \dots, z_N | \psi \rangle \right. \\ &\quad \left. + (-1)^\eta \langle z_1, \dots, z_j, \dots, z_i, \dots, z_N | \psi \rangle \right] \quad ; \quad \eta = 0 \text{ ou } 1. \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

Généralisation de la condition de contact. Pour une collection de N atomes, le modèle de portée effective unidimensionnel se généralise en considérant que le système vérifie l'équation de Schrödinger sans interaction tant que toutes les particules sont à des positions distinctes ($\forall k \neq l, z_k \neq z_l$) et que la fonction d'onde vérifie la condition de contact pour toutes les paires possibles :

$$\forall (i, j) \quad : \quad \lim_{z_{ij} \rightarrow 0^+} \left(1 + a_0 \partial_{z_{ij}} + R_0^3 \partial_{z_{ij}}^3 \right) \langle (z)_N | \hat{\Pi}_0^{ij} | \Psi \rangle = 0 \quad \text{secteur pair}, \quad (4.2.19)$$

$$\forall (i, j) \quad : \quad \lim_{z_{ij} \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{a_1} + \partial_{z_{ij}} - R_1 \partial_{z_{ij}}^2 \right) \langle (z)_N | \hat{\Pi}_1^{ij} | \Psi \rangle = 0 \quad \text{secteur impair}, \quad (4.2.20)$$

où la position du centre de masse Z_{ij} des particules i et j ainsi que les positions de toutes les autres particules z_k pour $k \neq i, j$ sont maintenues fixes lors du passage à la limite.

4.3 Résultats connus pour le problème à N corps pour les modèles de contact

Les modèles de contact unidimensionnels, et en particulier le modèle de Lieb-Liniger-McGuire défini dans la section 4.2.2, ont été très étudiés. Dans cette partie nous rappelons quelques résultats connus de ces modèles concernant le problème à N corps.

4.3.1 Hamiltonien

Les modèles de Wigner-Bethe-Peierls unidimensionnels sont équivalents à un Hamiltonien à N particules de masse m :

$$\sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i < j} \hat{V}_\eta(\hat{z}_{ij}) \quad (4.3.1)$$

contenant le potentiel d'interaction à deux corps de portée nulle suivant [16, 88]² :

$$\langle z|\hat{V}_0|\phi\rangle = g_0\delta(z)\phi(z) \quad \text{ou} \quad \langle z|\hat{V}_1|\phi\rangle = g_1 \left[\frac{\phi'(0^+) + \phi'(0^-)}{2} \right] \delta'(z), \quad (4.3.2)$$

où les constantes sont reliées aux longueurs de diffusion par :

$$g_0 = \frac{-2\hbar^2}{ma_0} \quad \text{ou} \quad g_1 = \frac{-2\hbar^2 a_1}{m}. \quad (4.3.3)$$

Dans l'équation (4.3.2), la distribution δ' est la dérivée de la distribution δ de Dirac. Le potentiel V_0 permet une diffusion dans le secteur pair, alors que le potentiel V_1 autorise une diffusion dans le secteur impair. Ces modèles prédisent l'existence d'un état lié à deux corps d'énergie $-\frac{\hbar^2}{ma_\eta^2}$ dans le secteur pair ou impair si et seulement si $a_\eta > 0$.

4.3.2 Diagramme de phase du secteur pair

Le problème à N corps pour une diffusion dans le secteur pair est intégrable : on peut donc trouver les états propres et les énergies associées grâce à la méthode de l'ansatz de Bethe ce qui permet de connaître le diagramme de phase bosonique complet. Pour une interaction répulsive ($a_0 < 0$) les bosons forment un gaz de Lieb-Liniger [20, 21]. Pour une interaction attractive ($a_0 > 0$) l'état fondamental est un soliton d'énergie $\frac{-1}{24} \frac{mg_0^2}{\hbar^2} N(N^2 - 1)$ [74] et les états excités peuvent être construits en généralisant l'ansatz de Bethe à des quasi-impulsions complexes [104]. Dans ce cas, ces excitations correspondent à l'éjection d'une ou de plusieurs particules de la phase solitonique.

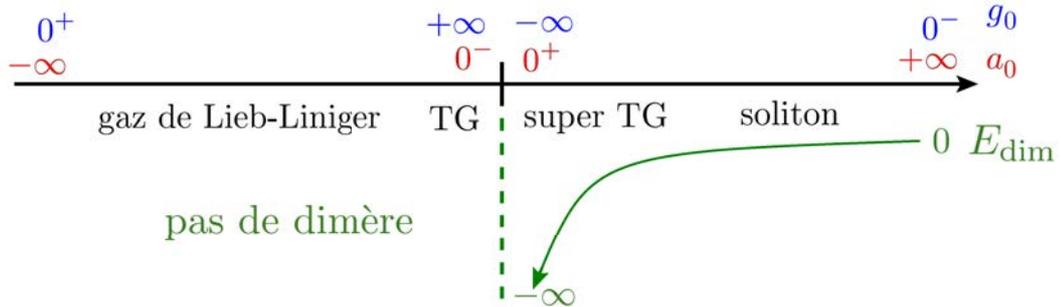


Fig. 4.1 Diagramme de phase bosonique prédit par le modèle de Lieb-Liniger-McGuire

Le processus de diffusion décrit par le modèle de Lieb-Liniger-McGuire est résonant lorsque a_0 est nul. Dans la limite où $a_0 = 0^-$, le gaz de bosons se comporte comme un gaz de fermions sans interaction où la forte interaction répulsive bosonique joue le rôle de principe d'exclusion de Pauli. On parle alors de fermionisation. Dans cette limite, l'état fondamental est un gaz de Tonks-Girardeau [10] qui a été observé en 2004 pour

2. Dans les références [103, 88], on peut trouver des expressions plus générales de ces pseudo-potentiels unidimensionnels utilisant le formalisme du Λ -potentiel.

un gaz libre [11] et pour un gaz sur réseau [12], et dont les excitations ont été mesurées [78, 79].

Dans la limite de forte interaction attractive ($a_0 = 0^+$), l'énergie des états de type solitoniques divergent. Les états excités forment alors un gaz de super Tonks-Girardeau prédit et étudié numériquement depuis 2005 [13, 105, 106] et observé en 2009 [14].

4.3.3 Mise en correspondance bosons-fermions

La forme très particulière des modèles de Wigner-Bethe-Peierls permet d'effectuer des bijections entre systèmes bosonique et fermionique.

Le théorème de mise en correspondance de Girardeau. Considérons un ensemble unidimensionnel de N sphères dures de rayon R et de masse m en interaction. L'équation de Schrödinger dépendante du temps de ce système est :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle (z)_N | \Psi(t) \rangle = \left[\frac{-1}{2m} \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} + V[(z)_N, t] \right] \langle (z)_N | \Psi(t) \rangle \quad (4.3.4)$$

$$\langle (z)_N | \Psi(t) \rangle = 0 \quad \text{pour} \quad |z_j - z_k| < 2R. \quad (4.3.5)$$

La condition de sphère dure est incluse dans la condition (4.3.5). Ainsi, le potentiel $V[(z)_N, t]$ dans l'équation de Schrödinger (4.3.4) ne prend pas en compte la répulsion de cœur dur des particules.

Le théorème de mise en correspondance de Girardeau [10] assure que si $\langle (z)_N | \Psi_F(t) \rangle$ est une fonction d'onde antisymétrique représentant N fermions impénétrables qui satisfait donc aux équations (4.3.4) et (4.3.5), alors la fonction d'onde $|\Psi_B(t)\rangle$ définie par :

$$\langle (z)_N | \Psi_B(t) \rangle = A[(z)_N] \langle (z)_N | \Psi_F(t) \rangle \quad ; \quad A[(z)_N] = \prod_{1 \leq j < k \leq N} \text{sgn}(z_k - z_j), \quad (4.3.6)$$

est une fonction d'onde à N corps vérifiant la symétrie bosonique et satisfaisant aux équations (4.3.4) et (4.3.5) avec la même énergie que $|\Psi_F(t)\rangle$. Dans l'équation (4.3.6), la fonction antisymétrique unitaire $A[(z)_N]$ assure que la fonction d'onde $|\Psi_B(t)\rangle$ est symétrique. La démonstration de ce théorème s'effectue en considérant chacun des domaines où les z_k sont distincts deux à deux et où $\langle (z)_N | \Psi_B(t) \rangle = \pm \langle (z)_N | \Psi_F(t) \rangle$. Lorsque $z_j = z_l$, la condition (4.3.5) impose que les fonctions d'onde (bosonique ou fermionique) s'annulent. Cette condition donc est essentielle.

Ce théorème permet, par exemple, de transformer un problème bosonique en interaction répulsive forte en un problème fermionique sans interaction, beaucoup plus facile à traiter théoriquement (cf par exemple [107, 108, 109, 110, 111]).

Dans la limite où $R \rightarrow 0$, cette mise en correspondance reste possible sous réserve que les fonctions d'onde s'annulent bien lorsque deux particules sont au contact l'une de l'autre [101].

4.3.4 Régime de Tonks-Girardeau fermionique

Interaction de Wigner-Bethe-Peierls. Dans le même état d'esprit, il est possible de relier un gaz de bosons en interaction de Wigner-Bethe-Peierls dans le secteur pair et

un gaz de fermions totalement polarisés mais cette fois-ci en interaction dans le secteur impair. Les fonctions d'onde de ces deux gaz vérifient l'équation de Schrödinger sans interactions partout sauf au contact de deux particules, où l'interaction est remplacée par une condition de contact qui ne prend en compte que la longueur de diffusion dans le secteur pair a_0 pour les bosons ou la longueur de diffusion a_1 dans le secteur impair pour les fermions :

$$\forall i \neq j, \lim_{z_{ij} \rightarrow 0^+} (1 + a_0 \partial_{z_{ij}}) \langle (z)_N | \Psi_B \rangle = 0 \quad (4.3.7)$$

$$\forall i \neq j, \lim_{z_{ij} \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{a_1} + \partial_{z_{ij}} \right) \langle (z)_N | \Psi_F \rangle = 0. \quad (4.3.8)$$

Les conditions de contact des équations (4.3.7) et (4.3.8) n'étant valables que si les fonctions d'ondes Ψ_B et Ψ_F vérifient les symétries par échange de particules paire pour les bosons et impaire pour les fermions. En utilisant la correspondance (4.3.6) pour des fonctions d'onde stationnaires et l'antisymétrie qui impose que Ψ_F s'annule lorsque deux particules sont au contact, on montre que si une fonction bosonique vérifie la condition de contact (4.3.7), alors la fonction fermionique définie par la correspondance vérifie celle de l'équation (4.3.8) avec comme longueur de diffusion $a_0 \leftrightarrow a_1$ [102, 112].

Ces interactions sont équivalentes à des potentiels ponctuels dont l'intensité dépend de la longueur de diffusion [voir l'équation (4.3.2)], de sorte que lors de cette correspondance, une interaction forte bosonique est reliée à une interaction fermionique faible, et inversement. En particulier, pour $a_1 \rightarrow \infty$, le système fermionique est en correspondance avec un système bosonique sans interaction ($a_0 \rightarrow \infty$). Par analogie, cette limite est appelée Tonks-Girardeau fermionique [108, 113, 114, 115, 116, 117]. Dans le cas où l'on fait correspondre un gaz de fermions sans interaction ($a_1 \rightarrow 0$) avec un gaz de bosons en interaction forte ($a_0 \rightarrow 0$), on retrouve la correspondance du théorème de Girardeau de 1960.

Portée effective. Dans le cadre d'une théorie de portée effective, les conditions de contact (4.3.7) et (4.3.8) sont remplacées par :

$$\forall i \neq j, \lim_{z_{ij} \rightarrow 0^+} (1 + a_0 \partial_{z_{ij}} + R_0^3 \partial_{z_{ij}}^3) \langle (z)_N | \Psi_B \rangle = 0 \quad (4.3.9)$$

$$\forall i \neq j, \lim_{z_{ij} \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{a_1} + \partial_{z_{ij}} - R_1 \partial_{z_{ij}}^2 \right) \langle (z)_N | \Psi_F \rangle = 0. \quad (4.3.10)$$

On remarque en particulier que la puissance de la dérivée du terme de portée effective dans les conditions de contact n'est pas la même pour le secteur pair (4.3.9) et pour le secteur impair (4.3.10). La démonstration de la correspondance bosons-fermions qui a lieu pour une interaction de type Wigner-Bethe-Peierls ne peut donc pas s'appliquer pour une théorie de portée effective.

Cette remarque est d'autant plus importante que le terme de portée effective du secteur impair ne peut en général pas être négligé [88] – le régime de Tonks-Girardeau fermionique n'est, en pratique, réalisable que pour des résonances et des gammes de paramètres très étroites. En effet, ce régime n'est observable que dans la limite où la

distance moyenne entre atomes est grande devant le terme de portée effective R_1 . Pour des valeurs typiques de piègeages expérimentaux, cette condition sera vérifiée pour des expériences mettant en jeu un petit nombre d'atomes [88].

4.4 Intégrabilité des modèles de portées effectives

En 2010, l'ansatz de Bethe (voir annexe 4.A) a été utilisé pour résoudre le problème à N fermions identiques dans un espace unidimensionnel et interagissant entre eux *via* un modèle de portée effective [41]. Il nous a semblé intéressant d'appliquer cette même méthode pour traiter le cas bosonique également avec un modèle de portée effective. En effet, l'utilisation de ce modèle est justifiée par l'article [39] au voisinage de certaines résonances de Feshbach étroites. Le cas sans portée effective a déjà été traité en 1963 par Lieb et Liniger lorsqu'il n'existe pas d'état lié à deux corps [20, 21], et par McGuire puis Castin lorsqu'il y en a un [74, 104].

La méthode de l'ansatz de Bethe a déjà été utilisée pour traiter de problématiques proches. Elle a servi à décrire des états de diffusion pour un système bosonique dans un modèle de portée effective [40] et à décrire un gaz bosonique au voisinage d'une résonance de Feshbach étroite pour des gammes de paramètre où il n'existe pas d'état lié [42]. Tous ces articles supposent donc implicitement que les systèmes considérés sont intégrables (voir annexe 4.A).

Cette hypothèse entre en contradiction avec l'utilisation du critère de Yang-Baxter-McGuire [101] qui affirme que le modèle de Lieb-Liniger-McGuire est intégrable alors que les autres modèles cités dans ce paragraphe – en particulier les modèles de portée effective – ne le sont pas.

Nous avons donc décidé d'étudier le problème à trois corps qui est au centre des propriétés d'intégrabilité avec un modèle hamiltonien unidimensionnel à deux voies qui est équivalent, pour le problème à deux corps, au modèle de portée effective. Ceci nous permet de tester les critères d'application des conditions de contact et de l'ansatz de Bethe. Nous avons trouvé en particulier que les modèles de contact ne sont pas bien définis pour le problème à trois corps et nous proposons une condition supplémentaire à ajouter à ces modèles pour pallier ce problème.

4.5 Modèles à deux voies unidimensionnels

4.5.1 Hamiltonien

En seconde quantification, le Hamiltonien du modèle à deux voies unidimensionnel sans interaction directe pour des atomes de masse m et des molécules de masse $2m$ est :

$$\hat{H}_\eta = \int \frac{dk}{2\pi} \left[\epsilon_k \hat{a}_{\eta,k}^\dagger \hat{a}_{\eta,k} + \left(\frac{\epsilon_k}{2} + E_\eta^m \right) \hat{b}_{\eta,k}^\dagger \hat{b}_{\eta,k} \right] + \left[\frac{\hbar^2 \lambda_\eta}{m} \int \frac{dK dk}{(2\pi)^2} \langle k | \delta_\epsilon^\eta \rangle \hat{a}_{\eta, \frac{K}{2}+k}^\dagger \hat{a}_{\eta, \frac{K}{2}-k}^\dagger \hat{b}_{\eta,K} + \text{h.c.} \right]. \quad (4.5.1)$$

La principale différence entre le secteur pair ($\eta = 0$) et le secteur impair ($\eta = 1$) est la symétrie du couplage entre les deux voies. Pour une diffusion dans le secteur pair,

ce modèle à deux voies est une version simplifiée de celui de l'article [42] qui prend en compte également une interaction directe dans la voie ouverte³. L'énergie cinétique est :

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.5.2)$$

L'opérateur $a_{0,k}^\dagger$ crée une particule bosonique de nombre d'onde k , $a_{1,k}^\dagger$ une particule fermionique de nombre d'onde k , et $b_{\eta,k}^\dagger$ une molécule bosonique de nombre d'onde k dans le secteur pair ou impair. Ces opérateurs satisfont donc aux relations de commutation :

$$\left[\hat{a}_{\eta,k}, \hat{a}_{\eta,k'}^\dagger \right]_\eta = (2\pi)\delta(k-k') ; \left[\hat{a}_{\eta,k}, \hat{a}_{\eta,k'} \right]_\eta = 0 ; \left[\hat{b}_{\eta,k}, \hat{b}_{\eta,k'}^\dagger \right]_0 = (2\pi)\delta(k-k'), \quad (4.5.3)$$

où $[\hat{A}, \hat{B}]_0$ (resp. $[\hat{A}, \hat{B}]_1$) représente le commutateur (resp. anticommutateur) entre les opérateurs \hat{A} et \hat{B} . Tous les autres commutateurs entre un opérateur atomique et un opérateur moléculaire sont nuls. La fonction de coupure est toujours choisie gaussienne :

$$\langle k | \delta_\epsilon^\eta \rangle = (ik)^\eta e^{-k^2 \epsilon^2 / 4}. \quad (4.5.4)$$

Dans le cas d'une diffusion dans le secteur pair, la définition de cette fonction est la même que l'équation (4.8.1). Pour une diffusion dans le secteur impair, cette fonction de coupure tend, lorsque $\epsilon \rightarrow 0$, vers la dérivée de la distribution de Dirac.

4.5.2 Amplitude de diffusion

Afin d'obtenir les expressions des paramètres de la diffusion, on utilise l'ansatz à deux corps suivant dans le référentiel du centre de masse (voir par exemple [61, 68, 66] pour des calculs similaires à 3D) :

$$|\psi_\eta\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \alpha_\eta(k) \hat{a}_{\eta,k}^\dagger \hat{a}_{\eta,-k}^\dagger |0\rangle + \beta_\eta \hat{b}_{\eta,0}^\dagger |0\rangle. \quad (4.5.5)$$

Les éléments des matrices de transition de ces modèles peuvent alors s'écrire sous la forme :

$$\langle k | \hat{T}_\eta(E + i0^+) | k_0 \rangle = \frac{\langle k | \delta_\epsilon^\eta \rangle \langle \delta_\epsilon^\eta | k_0 \rangle}{\frac{m^2(E - E_\eta^m)}{2\hbar^4 |\lambda_\eta|^2} - \langle \delta_\epsilon^\eta | \hat{G}_\eta^0(E + i0^+) | \delta_\epsilon^\eta \rangle}, \quad (4.5.6)$$

où la résolvante du système sans couplage $\hat{G}_\eta^0(E + i0^+)$ est définie par :

$$\hat{G}_\eta^0(E + i0^+) = \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{|k'\rangle \langle k'|}{E + i0^+ - \frac{\hbar^2 k'^2}{m}}. \quad (4.5.7)$$

On trouve alors le lien entre les paramètres du modèle à deux voies et ceux des amplitudes de diffusion des équations (4.2.6) et (4.2.8) :

$$a_0 = \frac{E_0^m m}{|\lambda_0|^2 \hbar^2} \quad ; \quad R_0 = \left(\frac{1}{|\lambda_0|^2} \right)^{1/3} \quad \text{pour } \eta = 0 \quad (4.5.8)$$

$$\frac{1}{a_1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\epsilon} - \frac{m E_1^m}{\hbar^2 |\lambda_1|^2} \quad ; \quad R_1 = \frac{1}{|\lambda_1|^2} \quad \text{pour } \eta = 1 \quad (4.5.9)$$

3. Dans la Ref. [42], la limite de portée nulle $\epsilon \rightarrow 0$ est directement considérée; il n'y a donc pas de fonction $\langle k | \delta_\epsilon^0 \rangle$.

Dans la limite de portée nulle, chacun de ces deux Hamiltoniens à deux voies \hat{H}_η ($\eta = 0$ ou 1) est exactement équivalent pour le problème à deux corps au modèle de portée effective du secteur correspondant (pair ou impair), à condition de considérer lors du passage à la limite $\epsilon \rightarrow 0$ pour le secteur impair que l'énergie moléculaire s'adapte en divergeant de façon à ce que la longueur de diffusion de ce secteur garde une valeur fixée a_1 .

4.5.3 Équation intégrale

L'ansatz utilisé pour le problème à 3 corps comprend, dans le référentiel du centre de masse, d'une part une collection de 3 atomes, et de l'autre un ensemble d'une molécule et d'un atome :

$$|\Psi_\eta\rangle = \int \frac{dkdK}{(2\pi)^2} \frac{\langle k, K | \psi_\eta^p \rangle}{\sqrt{3!}} \hat{a}_{\eta, \frac{K}{2} + k}^\dagger \hat{a}_{\eta, \frac{K}{2} - k}^\dagger \hat{a}_{\eta, -K}^\dagger |0\rangle + \int \frac{dK}{(2\pi)} \frac{\langle K | \psi_\eta^m \rangle \sqrt{3!}}{\lambda_\eta} \hat{b}_{\eta, K}^\dagger \hat{a}_{\eta, -K}^\dagger |0\rangle. \quad (4.5.10)$$

Projeté sur le sous-espaces de Hilbert de 3 atomes, l'équation de Schrödinger devient :

$$(E_K^{\text{rel}} - 2\epsilon_k) \langle k, K | \psi_\eta^p \rangle = \frac{2\hbar^2}{m} \left[\langle k | \delta_\epsilon^\eta \rangle \langle K | \psi_\eta^m \rangle + \langle -k_+ | \delta_\epsilon^\eta \rangle \langle K_+ | \psi_\eta^m \rangle + \langle k_- | \delta_\epsilon^\eta \rangle \langle K_- | \psi_\eta^m \rangle \right] \quad (4.5.11)$$

La fonction $\langle k, K | \psi_\eta^p \rangle$ est symétrique pour $\eta = 0$ et antisymétrique pour $\eta = 1$ par échange de deux particules :

$$(k \rightarrow -k) \quad \text{ou} \quad \left(k \rightarrow k_\pm = -\frac{3K}{4} \pm \frac{k}{2} \quad \text{et} \quad K \rightarrow K_\pm = -\frac{K}{2} \mp k \right). \quad (4.5.12)$$

Dans l'équation (4.5.11), l'énergie relative de la collision est :

$$E_K^{\text{rel}} = E - \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 K^2}{m}. \quad (4.5.13)$$

États de diffusion atome-molécule. Considérant un processus d'énergie $E_K^{\text{rel}} > 0$ et d'onde incidente dans le référentiel du centre de masse $|\psi_\eta^0\rangle$, on obtient l'équation intégrale suivante :

$$\frac{(ik_K^{\text{rel}})^{2\eta-1} \langle K | \psi_\eta^m \rangle}{f_\eta(k_K^{\text{rel}})} + \int \frac{dk}{2\pi} \mathcal{M}_\eta(K, k, E) \langle k | \psi_\eta^m \rangle = \int \frac{dk}{2\pi} (-ik)^\eta \langle k, K | \psi_\eta^0 \rangle. \quad (4.5.14)$$

Le noyau de l'équation intégrale (4.5.14) est défini par :

$$\mathcal{M}_\eta(K, k, E) = \frac{4(k + K/2)^\eta (K + k/2)^\eta}{-\frac{m}{\hbar^2} (E + i0^+) + K^2 + kK + k^2}, \quad (4.5.15)$$

et les amplitudes de diffusion des secteurs pair et impair sont définies par (4.2.6) et (4.2.8). Le nombre d'onde associé à l'énergie relative est défini par :

$$k_K^{\text{rel}} = \sqrt{\frac{mE_K^{\text{rel}}}{\hbar^2}}. \quad (4.5.16)$$

États liés atome-molécule. Pour ces états liés, l'énergie relative est négative :

$$E_K^{\text{rel}} = \frac{-\hbar^2 (q_K^{\text{rel}})^2}{m} \quad ; \quad q_K^{\text{rel}} > 0. \quad (4.5.17)$$

Dans ce cas, il n'y a pas d'onde incidente, donc le terme source s'annule. L'équation intégrale est ainsi trouvée en effectuant un prolongement analytique $ik_K^{\text{rel}} = -q_K^{\text{rel}}$. Les dénominateurs ne pouvant s'annuler, les prescriptions $+i0^+$ dans le noyau sont obsolètes :

$$\frac{(-q_K^{\text{rel}})^{2\eta-1} \langle K | \psi_\eta^{\text{m}} \rangle}{f_\eta(iq_K^{\text{rel}})} + \int \frac{dk}{2\pi} \mathcal{M}_\eta(K, k, E) \langle k | \psi_\eta^{\text{m}} \rangle = 0. \quad (4.5.18)$$

Pour le secteur impair, cette équation n'est bien posée que si $R_1 \neq 0$. En effet, dans le cas contraire, l'auto-cohérence des solutions impose que $\langle k | \psi_1^{\text{m}} \rangle = \frac{\text{cte}}{k} + o_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{k} \right)$ et l'intégrale de l'Eq. (4.5.18) n'est alors pas définie. Le terme de portée effective permet de corriger ce problème : il est donc essentiel pour que le problème soit bien posé.

Dans le secteur pair, l'équation intégrale (4.5.18) est bien posée même lorsque la portée effective s'annule.

4.6 Écart à l'intégrabilité

4.6.1 Critère de Yang-Baxter-McGuire

Le critère de Yang-Baxter donne une condition nécessaire pour qu'un système soit intégrable, ce qui permet de savoir lorsque l'ansatz de Bethe peut être une solution du problème. Il peut être exprimé sous différentes formes [101], par exemple grâce aux coefficients de transmission et de réflexion définis par l'équation (4.2.4)[74] :

$$\boxed{r(k_{23})t(k_{13})r(k_{12}) = t(k_{12})r(k_{13})r(k_{23}) + r(k_{12})r(k_{13})t(k_{23})} \quad ; \quad k_{ij} = \frac{k_i - k_j}{2}. \quad (4.6.1)$$

Cette forme considère l'interaction deux à deux entre trois particules. En effet, la non intégrabilité ne peut apparaître que pour un système d'au moins trois particules. Si cette égalité n'est pas satisfaite, alors la partie diffractive de l'équation (4.A.6) est non nulle et le système n'est pas intégrable. Les résultats donnés par ce critère sont différents pour les deux secteurs d'interaction à deux corps.

Secteur pair. Le critère de Yang-Baxter-McGuire est vérifié si⁴

$$(a_0 \in \mathbb{R} \quad \text{et} \quad R_0 = 0) \quad \text{ou} \quad (|a_0| \rightarrow \infty \quad \text{et} \quad R_0 \in \mathbb{R}^*), \quad (4.6.2)$$

c'est-à-dire lorsque la portée effective est négligeable devant la longueur de diffusion [20, 21, 104]. Cette situation est physiquement pertinente et est valide pour de nombreux systèmes [11, 12, 118, 14]. Dans le cas contraire, le système n'est pas intégrable [101].

4. Attention à ne pas confondre \mathbb{R}^* qui est l'ensemble des réels privé de 0 et la longueur R^* qui caractérise la largeur d'une résonance de Feshbach.

Secteur impair. Lorsque le système possède une interaction à deux corps de portée effective dans le secteur impair, le cas physique où le critère de Yang-Baxter est vérifié est :

$$|a_1| \rightarrow \infty \quad \text{et} \quad R_1 \in \mathbb{R}. \quad (4.6.3)$$

Le critère de Yang-Baxter-McGuire montre que dans le secteur impair, le système ne peut être intégrable que pour des valeurs extrêmes de longueur de diffusion, quelle que soit la valeur du paramètre de portée effective. On s'attend donc à ce que le système subisse une grande déviation par rapport à la limite intégrable. C'est ce que l'on observe numériquement (cf paragraphe 4.6.5).

4.6.2 Ansatz de Bethe pour un modèle de portée effective

La méthode de l'ansatz de Bethe [20, 104] permet de trouver une fonction d'onde à N corps vérifiant les conditions de contact à deux corps des équations (4.2.19) et (4.2.20) avec comme hypothèse qu'aucune particule autre n'est présente entre les deux particules dont on considère le contact – les particules sont tout d'abord rangées dans un certain ordre, puis on considère que deux particules adjacentes se rapprochent tout en gardant fixés les autres degrés de liberté. En se limitant à l'état de plus basse énergie dans le cas où il existe un état lié à deux corps ($a_0 \in \mathbb{R}$ ou $a_1 > 0$), on trouve les fonctions d'onde suivante :

$$\langle (z)_N | \psi_{AB}^0 \rangle \propto \exp \left(-\kappa_0 \sum_{1 \leq i < j \leq N} |z_i - z_j| \right), \quad (4.6.4)$$

$$\langle (z)_N | \psi_{AB}^1 \rangle \propto \exp \left(-\kappa_1 \sum_{1 \leq i < j \leq N} |z_i - z_j| \right) \times \prod_{1 \leq i < j \leq N} \text{sgn}(z_i - z_j). \quad (4.6.5)$$

dont les énergies sont :

$$E_\eta = \frac{-\hbar^2 \kappa_\eta^2}{6m} N(N^2 - 1), \quad (4.6.6)$$

et où les nombres d'onde κ_η sont définis à partir des énergies des états liés à deux corps [cf Eqs. (4.2.9) et (4.2.10)].

Remarque. L'équation (4.6.6) est suspecte. Considérons pour des bosons ($\eta = 0$) le cas où le nombre de particule est grand ($N \rightarrow \infty$). L'état lié à N corps est de plus en plus ramassé sur lui-même, donc le nombre d'onde relatif devrait diverger. Le terme de portée effective devrait dominer au dénominateur de l'amplitude de diffusion $f_0(k)$, ce que (4.6.6) ne traduit pas. En particulier dans le régime où $R_0 \ll a_0$, la diffusion entre bosons entre *a priori* dans le régime de Born, puisque c'est le cas à 1D aux grands nombres d'onde. Un calcul de champ moyen sur le modèle à deux voies (avec un état cohérent) devrait donner un résultat fort différent de (4.6.6). Dans le cas de fermions ($\eta = 1$), l'argument physique est le même et le champ moyen serait de type BCS⁵.

5. Cette remarque est due à Y. Castin.

4.6.3 L'ansatz de Bethe est-il solution de l'équation intégrale ?

Nous montrons dans l'article [43] dans le cas où $N = 3$ que les fonctions d'onde atome-molécule associées aux ansatz de Bethe dans les secteurs pair (4.6.4) et impair (4.6.5) sont, à une constante de normalisation près :

$$\langle Z | \psi_\eta^{\text{m,BA}} \rangle \propto e^{-2\kappa_\eta |Z|} \text{ pour } Z \neq 0 \quad ; \quad \langle K | \psi_\eta^{\text{m,BA}} \rangle \propto \frac{1}{K^2 + 4\kappa_\eta^2}, \quad (4.6.7)$$

où $\langle Z | \psi_0^{\text{m,BA}} \rangle$ est continu pour des bosons en $Z = 0$ alors que ce n'est pas le cas des fermions car $\langle Z = 0 | \psi_1^{\text{m,BA}} \rangle = 0$.

Secteur pair. Dans le cadre d'un modèle de Lieb-Liniger-McGuire ($a_0 \in \mathbb{R}$ et $R_0 = 0$), la fonction d'onde atome-molécule donnée par l'ansatz de Bethe (4.6.7) est solution de l'équation intégrale (4.5.18). De façon cohérente avec le critère de Yang-Baxter-McGuire de la Sec. 4.6.1 et les articles [20, 104, 101], on en conclut que ce système est intégrable.

La réponse est très différente pour le modèle portée effective dans le secteur pair ($a_0 \in \mathbb{R}$ et $R_0 > 0$). En effet, l'auto-cohérence des solutions de l'équation intégrale (4.5.18) impose que le comportement à grands K de celles-ci soit :

$$\langle K | \psi_0^{\text{m}} \rangle = \frac{\text{cte}}{K^4} + o_{K \rightarrow \infty}(K^{-4}). \quad (4.6.8)$$

L'ansatz de Bethe, qui possède un comportement asymptotique en K^{-2} , ne peut pas être solution ; ce système ne peut donc pas être intégrable.

Les limites $a_0 \rightarrow \pm\infty$ à R_0 fixé sont particulières et sont traitées dans les paragraphes suivants.

Limite $a_0 \rightarrow +\infty$ pour R_0 fixé. Dans ce cas, il existe un état lié à trois corps d'énergie $E \approx \frac{-4\hbar^2}{ma_0^2}$, quelle que soit la valeur de R_0 (incluant $R_0 = 0$). L'état fondamental est cohérent avec une solution solitonique : on retrouve les résultats de [74, 104].

Limite $a_0 \rightarrow -\infty$ pour R_0 fixé. Cette limite est plus originale. En effet, il existe dans ce cas un état lié à deux corps d'énergie E qui diverge : $E \approx \frac{\hbar^2 a_0}{m R_0^3}$. Ce scénario est différent de la théorie de Lieb-Liniger ($R_0 = 0$) où il n'existe pas d'état lié à deux corps. Numériquement, il existe un état lié à trois corps dont l'énergie tend vers celle du dimère. L'étude de la diffusion atome-dimère effectuée dans la partie 4.7 n'est pas incompatible avec le fait que, dans cette limite, l'état fondamental pour une collection de N atomes puisse être un gaz intégrable de dimères de type Lieb-Liniger. Seule une étude du problème à quatre corps (et plus) pourrait cependant démontrer cette supposition.

Secteur impair. Dans le modèle de portée effective ($a_1 \in \mathbb{R}_+$ et $R_1 \in \mathbb{R}_+^*$), l'ansatz de Bethe du secteur impair n'est jamais solution de l'équation intégrale (4.5.18).

4.6.4 Équivalence des modèles pour le problème à trois corps

Les deux modèles à deux voies de l'équation (4.5.1) dans la limite de portée nulle et les modèles de contact définis par les équations (4.2.19) et (4.2.20) sont équivalents concernant le problème à deux corps. En effet, ces modèles donnent la même amplitude de diffusion [Eq. (4.2.6) pour le secteur pair et Eq. (4.2.8) pour le secteur impair], le lien entre les paramètres des différents modèles étant donné par les équations (4.5.8) et (4.5.9).

Cependant, ces modèles ne sont pas équivalents pour le problème à trois corps. En effet, comme nous l'avons vu précédemment, l'ansatz de Bethe vérifie les conditions de contact sans être solution des équations intégrales données par les modèles à deux voies unidimensionnels.

Pour obtenir l'équivalence, il est nécessaire d'imposer une contrainte supplémentaire aux modèles de contact des secteurs pair et impair pour filtrer les solutions physiques. Nous avons montré dans l'article [43] qu'imposer la continuité des fonctions d'onde atome-molécule à l'origine dans le secteur impair, ou celle de sa dérivée pour le secteur pair :

$$\partial_Z^{1-\eta} \langle Z | \psi_\eta^m \rangle \text{ est continu en } Z = 0 \text{ pour } \eta = 0 \text{ ou } 1, \quad (4.6.9)$$

permet d'obtenir l'équivalence des modèles pour le problème à trois corps. Grâce à cette condition supplémentaire, il est possible de démontrer les deux mêmes équations intégrales que celle des modèles à deux voies à partir des modèles de contact.

L'ajout de conditions servant à filtrer les solutions physiques se retrouve souvent dans le problème à petit nombre de corps pour des atomes froids, car les modèles de contact ne sont pas toujours bien définis pour le problème à N corps. On peut par exemple effectuer un parallèle avec la physique d'Efimov où il est nécessaire d'ajouter un ingrédient supplémentaire pour étudier le problème à trois corps à partir d'un modèle de contact, que ce soit le paramètre à trois corps [119] ou une condition nodale sur la fonction d'onde [120].

4.6.5 Étude numérique du spectre des états liés à trois corps

Nous nous limitons ici aux gammes de paramètres physiques pour lesquels il existe un état lié à deux corps, *i.e.*

$$(a_0 \in \mathbb{R} \quad \text{et} \quad R_0 \in \mathbb{R}_+) \quad \text{ou} \quad (a_1 \in \mathbb{R}_+ \quad \text{et} \quad R_1 \in \mathbb{R}_+), \quad (4.6.10)$$

et nous étudions les énergies des trimères $E = \frac{-\hbar^2 (q_\eta^t)^2}{m}$ prédits par les modèles à deux voies en résolvant numériquement les équations intégrales de l'équation (4.5.18) dans les secteurs pair et impair. Sur la Fig. 4.2, nous traçons le nombre d'onde associé au trimère q_η^t en fonction du nombre d'onde associé au dimère κ_η qui est défini par les équations (4.2.9) ou (4.2.10). La région où $R_\eta \kappa_\eta \ll 1$ correspond à la limite où $a_\eta \gg R_\eta$. Au contraire, dans la région opposée où $R_\eta \kappa_\eta \gg 1$, $a_0 \ll -R_0$ dans le secteur pair ou $a_1 \ll R_1$ dans le secteur impair.

Par construction, le nombre d'onde $q_\eta^{t,BA}$ associé à l'énergie d'un trimère prédit par l'ansatz de Bethe vérifie quel que soit le secteur considéré :

$$q_\eta^{t,BA} = 2\kappa_\eta. \quad (4.6.11)$$

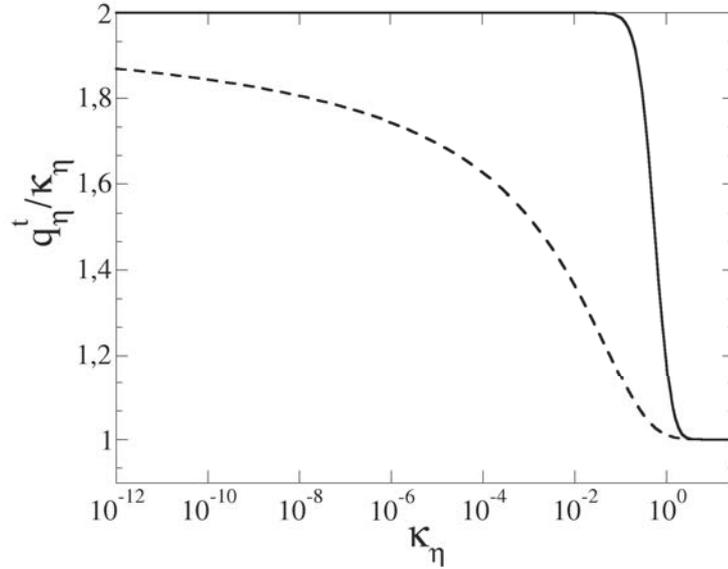


Fig. 4.2 Nombre d'onde du trimère q_η^t en unité du nombre d'onde du dimère κ_η pour le secteur pair (ligne pleine) et pour le secteur impair (tireté) avec $R_\eta = 1$. L'asymptote $q_\eta^t = 2\kappa_\eta$ correspond à l'énergie prévue par l'ansatz de Bethe.

Secteur pair. Dans le secteur pair, l'énergie du trimère varie brutalement avec celle du dimère. Lorsque $\kappa_0 \ll 1/R_0$, le système est intégrable et son énergie est donnée par l'ansatz de Bethe. L'état fondamental est alors un état lié de type solitonique [104]. Dans le régime opposé où $\kappa_0 \gg 1/R_0$, l'énergie du trimère tend vers l'énergie du dimère. On s'attend donc à ce que l'état fondamental d'un système de N atomes dans ce régime soit un gaz de dimères fortement liés. Enfin, la zone intermédiaire où $R_0 \gg |a_0|$ est une zone de transition non intégrable entre ces deux régimes qui ne peut pas être décrit par un modèle de Wigner-Bethe-Peierls car la portée effective est essentielle.

Secteur impair. L'évolution de l'énergie du trimère dans le secteur impair est très différent. Bien que le régime où $\kappa_1 \gg 1/R_1$ soit semblable au régime où $\kappa_0 \gg 1/R_0$ du secteur pair, la zone de transition est extrêmement grande : en pratique, le régime intégrable lorsque $\kappa_1 \rightarrow 0$ n'est jamais atteint. Numériquement, on trouve que⁶ :

$$\frac{q_1^t}{\kappa_1} \sim 2 \left[1 + \frac{1.86}{\ln(0.466\kappa_1)} \right]. \quad (4.6.12)$$

Pour des valeurs expérimentales raisonnables, le système ne peut jamais être considéré comme intégrable.

Fonction d'onde atome-molécule. Dans l'article [43], nous avons étudié numériquement la forme des fonctions d'onde atome-molécule. Confirmant les résultats sur les énergies, nous avons constaté dans le secteur pair que $\langle K | \psi_0^m \rangle$ converge rapidement

6. Avec $R_1 = 1$.

vers $\langle K|\psi_0^{m,BA}\rangle$ lorsque $\kappa_0 \ll 1$. Au contraire, dans le secteur impair, $\langle K|\psi_1^m\rangle$ semble converger extrêmement lentement vers la forme intégrable $\langle K|\psi_1^{m,BA}\rangle$ de sorte que, même pour des valeurs extrême de κ_1 , la fonction d'onde atome-molécule calculée numériquement à partir de l'équation intégrale est encore très loin de la fonction d'onde prévue par l'ansatz de Bethe. Ce résultat est illustré par la Fig. 4.3.

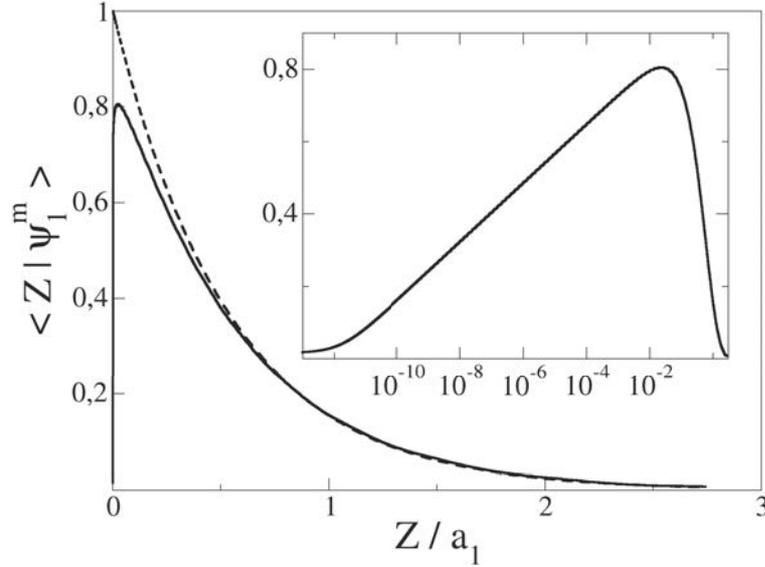


Fig. 4.3 Ligne continue : fonction d'onde atome-molécule dans le secteur impair pour $\kappa_1 = 10^{-12}/R_{1D}$; pointillés : fonction d'onde atome-molécule prévue par l'ansatz de Bethe qui est discontinue et s'annule en 0. La normalisation des deux courbes est arbitraire. L'insert est un zoom en échelle logarithmique pour de petites distances.

4.7 Diffusion atome-dimère

4.7.1 Ansatz

Afin d'étudier la diffusion entre un atome et un dimère dans les cas où il existe un état lié à 2 corps et où l'énergie du système à trois corps est négative, on choisit comme ansatz⁷ pour la solution de l'équation intégrale (4.5.18) (cf les références [121, 122, 61, 120]) :

$$\langle K|\psi_\eta^{m,scat}\rangle = 2\pi\delta(K - k_0) + ig_\eta(K, k_0) \left(\frac{1}{k_0 + K + i0^+} + \frac{1}{k_0 - K + i0^+} \right), \quad (4.7.1)$$

où la fonction $g_\eta(K, k_0)$ est régulière et où le nombre d'onde k_0 est l'impulsion relative entre le dimère et l'atome :

$$q^2 = \kappa_\eta^2 - \frac{3}{4}k_0^2. \quad (4.7.2)$$

7. À une constante de normalisation près notée $\sqrt{P_{\text{closed}}}$ et qui correspond à la racine de la probabilité pour le dimère incident d'appartenir à la voie fermée.

Dans l'équation (4.7.2), l'énergie de l'état lié à trois corps est $\frac{-\hbar^2 q^2}{m}$ et celui de l'état lié à deux corps $\frac{-\hbar^2 \kappa_\eta^2}{m}$ est défini par (4.2.9) et (4.2.10). On remarque alors que :

$$E_{k_0}^{\text{rel}} = \frac{-\hbar^2 \kappa_\eta^2}{m}, \quad (4.7.3)$$

où l'énergie de collision est définie par l'équation (4.5.13). La transformée de Fourier de l'ansatz (4.7.1) de la diffusion atome-dimère pour des distances entre le dimère et l'atome $Z \neq 0$ est :

$$\langle Z | \psi_\eta^{\text{m,scat}} \rangle = e^{ik_0 Z} + g_\eta(\text{sgn}(Z)k_0, k_0) e^{ik_0 |Z|}. \quad (4.7.4)$$

On reconnaît bien, sous cette forme, la diffusion unidimensionnelle entre deux particules. Cette écriture permet de relier la fonction $g_\eta(K, k_0)$ aux amplitudes de diffusion entre un atome et un dimère⁸ [cf Eq. (4.2.2)] :

$$\langle Z | \psi_\eta^{\text{m,scat}} \rangle = \exp(ik_0 Z) + f_{\eta,0}^{\text{dp}}(k_0) \exp(ik_0 |Z|) + \text{sign}(Z) f_{\eta,1}^{\text{dp}}(k_0) \exp(ik_0 |Z|), \quad (4.7.5)$$

où l'on a :

$$f_{\eta,0}^{\text{dp}}(k_0) = \frac{1}{2} [g_\eta(k_0, k_0) + g_\eta(-k_0, k_0)] \quad ; \quad f_{\eta,1}^{\text{dp}}(k_0) = \frac{1}{2} [g_\eta(k_0, k_0) - g_\eta(-k_0, k_0)]. \quad (4.7.6)$$

À partir de ces quatre amplitudes de diffusion entre un dimère et une particule $f_{\eta,\eta'}^{\text{dp}}(k_0)$ pour un gaz bosonique ou fermionique ($\eta = 0$ ou 1) dans les secteurs pair ou impair ($\eta' = 0$ ou 1), on peut définir quatre longueurs de diffusion⁹ notées $a_{\eta,\eta'}^{\text{dp}}$:

$$a_{\eta,\eta'}^{\text{dp}} = \lim_{k_0 \rightarrow 0} \frac{1 - \eta'}{ik_0} + \frac{g_\eta(k_0, k_0) + (1 - 2\eta')g_\eta(-k_0, k_0)}{2ik_0}. \quad (4.7.7)$$

4.7.2 Équation intégrale pour la diffusion atome-dimère

Pour calculer numériquement les longueurs de diffusion atome-dimère, il suffit d'injecter l'ansatz (4.7.1) dans l'équation intégrale (4.5.18). On trouve alors l'équation intégrale suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\eta(K, k_0, E) &= \frac{2ik_0 \left(q_K^{\text{rel}}\right)^{2\eta-1} g_\eta(K, k_0)}{f_\eta[iq_K^{\text{rel}}](k_0^2 - K^2)} - 2ik_0 \mathcal{P} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} \frac{g_\eta(k, k_0) \mathcal{M}_\eta(K, k, E)}{k_0^2 - k^2} \\ &\quad - \frac{1}{2} [g_\eta(k_0, k_0) \mathcal{M}_\eta(K, k_0, E) + g_\eta(-k_0, k_0) \mathcal{M}_\eta(K, -k_0, E)]. \end{aligned} \quad (4.7.8)$$

Dans l'équation (4.7.8), les amplitudes de diffusion atome-atome sont toujours notées f_η [voir les équations (4.2.6) et (4.2.8)] et ne doivent pas être confondues avec les amplitudes de diffusion atome-dimère notées $f_{\eta,\eta'}^{\text{dp}}$. La valeur principale \mathcal{P} de l'intégrale provient de l'utilisation de la formule :

$$\frac{1}{x + i0^+} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) - i\pi \delta(x), \quad (4.7.9)$$

8. Les grandeurs associées seront notées avec un exposant dp pour dimère-particule.

9. Ces longueurs de diffusions sont appelées a_{ad} et b_{ad} dans certaines références par exemple dans les références [121] et [122].

et le nombre d'onde qui caractérise l'énergie de la collision est :

$$q_K^{\text{rel}} = \sqrt{\frac{-mE}{\hbar^2} + \frac{3}{4}K^2} \quad (4.7.10)$$

Par construction, $f_\eta(iq_{k_0}^{\text{rel}}) = 0$ si bien que le premier terme du membre de droite de l'équation intégrale (4.7.8) reste fini pour $K \rightarrow k_0$. Les quatre longueurs de diffusions atome-dimère $a_{\eta,\eta'}^{\text{dp}}$ sont extraites du comportement à petits nombres d'onde de la solution de l'équation intégrale (4.7.8). Elles sont tracées sur la figure 4.4 en fonction de nombre d'onde du dimère κ_η .

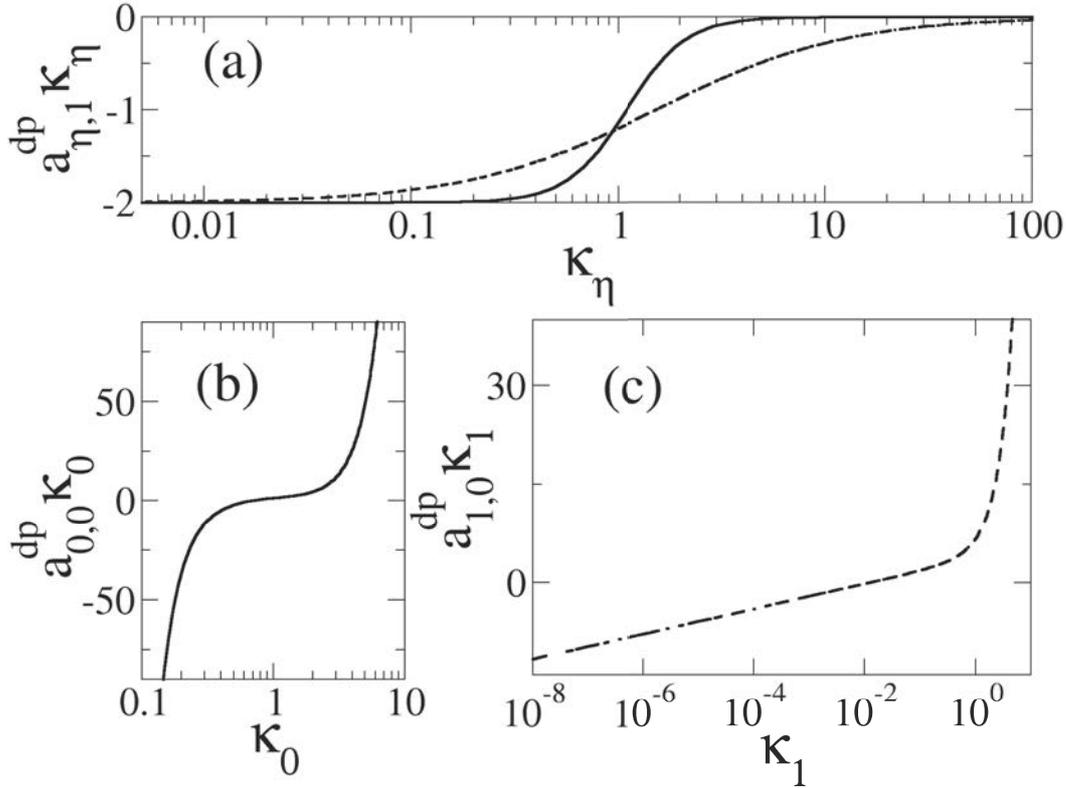


Fig. 4.4 Longueurs de diffusion atome-dimère (4.7.7) en fonction du nombre d'onde de l'énergie de liaison du dimère κ_η en unité de R_η . Ligne continue : système bosonique ($\eta = 0$) ; ligne discontinue : système fermionique ($\eta = 1$). Graphique (a) : secteur impair ($\eta' = 1$) ; graphique (b) : secteur pair pour les bosons ; graphique (c) : secteur pair pour les fermions.

4.7.3 Lois limites

Limite intégrable. Lorsque le système est intégrable, l'utilisation de l'ansatz de Bethe permet de trouver les valeurs exactes des longueurs de diffusions atome-dimère [122] :

$$a_{\eta,0}^{\text{dp}} \rightarrow -\infty \quad ; \quad a_{\eta,1}^{\text{dp}} = -2a_\eta \quad ; \quad (a_0 \gg R_0 \quad \eta = 0) \quad \text{ou} \quad (a_1 \rightarrow +\infty \quad \eta = 1), \quad (4.7.11)$$

ce qui est bien observé sur la figure 4.4 car dans cette limite $\kappa_\eta \rightarrow a_\eta$. En accord avec l'étude sur les énergies des états liés à trois corps, ces lois limites sont *rapidement* atteintes dans le cas bosonique ($\eta = 0$) contrairement au cas fermionique ($\eta = 1$).

Limite d'un dimère profond. Lorsqu'il existe un dimère profond ($\kappa_\eta \gg 1$), c'est-à-dire pour des bosons lorsque ($a_0 \ll -R_0$) ou pour des fermions lorsque ($0 < a_1 \ll R_1$), la diffusion atome-dimère s'effectue principalement dans le secteur pair ($\eta' = 0$) et l'état lié à trois corps peut être vu comme un état lié entre un dimère très fortement lié et un atome supplémentaire :

$$E + \frac{\hbar^2 \kappa_\eta^2}{m} = \frac{-\hbar^2}{2\mu_{\text{dp}}(a_{\eta,0}^{\text{dp}})^2} \quad ; \quad a_{\eta,1}^{\text{dp}} = 0, \quad (4.7.12)$$

où la masse réduite entre un dimère et un atome est :

$$\mu_{\text{dp}} = \frac{2}{3}m. \quad (4.7.13)$$

4.8 États liés dans le secteur pair dans une boîte

À titre de variation sur le thème du problème à trois corps, nous étudions dans cette partie le problème à deux et trois bosons emprisonnés dans une boîte unidimensionnelle, et interagissant dans le secteur pair. Cette partie sera l'occasion d'illustrer la méthode du filtrage en ϵ .

4.8.1 Filtrage en ϵ

Pour les mêmes raisons que dans la partie 1.6, il est intéressant de définir la condition de contact pour un filtrage en ϵ pour une interaction dans le secteur pair. Le raisonnement est très similaire à la partie 1.6, et la principale différence est la dimension du ket $\delta_\epsilon^{1\text{D}}$:

$$\langle z | \delta_\epsilon^{1\text{D}} \rangle = \frac{1}{\epsilon \sqrt{\pi}} \exp(-z^2/\epsilon^2) \quad ; \quad \langle k | \delta_\epsilon^{1\text{D}} \rangle = \exp\left(-\frac{k^2 \epsilon^2}{4}\right). \quad (4.8.1)$$

On considère alors une suite de fonctions qui vérifient l'équation de Schrödinger avec le terme source :

$$\left(\hat{H} - E\right) |\psi_\epsilon\rangle = -|S_\psi\rangle \otimes |\delta_\epsilon^{1\text{D}}\rangle, \quad (4.8.2)$$

où le ket $|S_\psi\rangle$ appartient au sous-espace du centre de masse. Dans le référentiel du centre de masse, ce ket n'est donc qu'un scalaire S qui dépend de l'énergie et est relié à l'amplitude de diffusion dans le secteur pair défini par l'équation (3.1.2) :

$$S = \frac{ik\hbar^2}{\mu} f_0(k). \quad (4.8.3)$$

La condition de contact s'exprime alors :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} B_\epsilon^{1\text{D}} \langle \delta_\epsilon^{1\text{D}} | \psi_\epsilon \rangle = 0, \quad (4.8.4)$$

où l'opérateur frontière est défini pour le modèle de portée effective unidimensionnel par :

$$B_\epsilon^{1D} = \left[1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}} a_0 \partial_\epsilon + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} R_0^3 \partial_\epsilon^3 \right]. \quad (4.8.5)$$

Un exemple d'application du filtrage en ϵ pour le modèle de portée effective est l'étude de deux ou trois particules de masse m dans une boîte de taille L avec conditions aux limites périodiques.

4.8.2 Deux atomes dans une boîte

Formalisme général. Dans toute cette partie, on choisit les définitions suivantes :

$$\langle z|k \rangle = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{L}} \quad ; \quad k = \frac{2\pi n}{L} \text{ avec } n \in \mathbb{Z} \quad ; \quad \chi_\epsilon(k) = \langle k|\delta_\epsilon \rangle = e^{-\epsilon^2 k^2/4}. \quad (4.8.6)$$

Pour alléger les notations, l'exposant 1D du ket $|\delta_\epsilon\rangle$ n'est plus indiqué jusqu'à la fin du chapitre. On utilise également les coordonnées du centre de masse et celles de la particule relative en représentation en impulsion :

$$K = k_1 + k_2 \quad ; \quad k = \frac{k_1 - k_2}{2}, \quad (4.8.7)$$

où les indices 1 et 2 font référence aux particules 1 et 2. D'après la partie 1.6, le problème se traite en écrivant l'équation de Schrödinger avec un terme source qui est déterminé à l'aide de la condition de contact de l'équation (4.8.4). L'équation de Schrödinger (4.8.2) s'inverse et on trouve :

$$\langle K, k|\Psi_\epsilon \rangle = -\frac{\langle K|S \rangle \chi_\epsilon(k)}{\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - E}. \quad (4.8.8)$$

Dans cette dernière équation ont été définies les masses totale et réduite de ce système de deux particules :

$$M = 2m \quad ; \quad \mu = \frac{m}{2}. \quad (4.8.9)$$

Cette partie sera traitée dans le référentiel du centre de masse où, par définition :

$$K = k_1 + k_2 = 0 \quad ; \quad k = \frac{k_1 - k_2}{2} = \frac{2\pi n}{L} \text{ avec } n \in \mathbb{Z}. \quad (4.8.10)$$

L'indice 1 de l'entier relatif n_1 a été enlevé pour plus de lisibilité. Dans un premier temps nous nous restreignons au cas où l'énergie est négative – le cas des états d'énergies positives est obtenu par prolongement analytique. Ceci nous permet de définir le nombre d'onde positif q tel que :

$$E = \frac{-\hbar^2 q^2}{2\mu}. \quad (4.8.11)$$

On peut alors écrire la fonction d'onde sous la forme :

$$\langle K = 0, k|\Psi_\epsilon \rangle = -\frac{2\mu \langle K = 0|S \rangle}{\hbar^2} \frac{\chi_\epsilon(k)}{k^2 + q^2}. \quad (4.8.12)$$

L'application de la condition de contact nécessite la connaissance du comportement pour des petits ϵ de la fonction :

$$\langle \langle K = 0 | \otimes \langle \delta_\epsilon | | \Psi_\epsilon \rangle = -\mathcal{S} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\sigma^2 n^2}}{n^2 + b^2}, \quad (4.8.13)$$

où les quantités adimensionnées sont définies par :

$$\mathcal{S} = \frac{\mu L}{2\hbar^2 \pi^2} \langle K = 0 | S \rangle \quad ; \quad b = \frac{Lq}{2\pi} \quad ; \quad \sigma = \frac{\sqrt{2\pi}\epsilon}{L}. \quad (4.8.14)$$

En utilisant la relation :

$$\frac{1}{n^2 + b^2} = \int_0^\infty du e^{-u(n^2 + b^2)}, \quad (4.8.15)$$

on peut réécrire l'équation (4.8.13) sous la forme de deux termes :

$$\langle \delta_\epsilon | \Psi_\epsilon \rangle = -\mathcal{S} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{\sigma^2 b^2}}{n^2 + b^2} + \mathcal{S} e^{\sigma^2 b^2} \int_0^{\sigma^2} du e^{-ub^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-n^2 u}. \quad (4.8.16)$$

Cette remarque permet de séparer cette somme en deux parties. Le premier terme du membre de droite de l'équation (4.8.16) est régulier et peut se calculer exactement grâce à l'identité :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{n^2 + b^2} = \frac{\pi \coth(\pi b)}{b}. \quad (4.8.17)$$

Le développement de ce terme ne comprend que des puissances paires de ϵ (ou σ). Au contraire, le second terme du membre de droite de l'équation (4.8.16) contient, dans son développement, des puissances impaires. Ce sont elles qui traduisent l'existence d'une interaction de contact – l'opérateur frontière n'agissant de façon non triviale que sur les puissances impaires de ϵ .

Formule sommatoire de Poisson. On peut développer ce terme en utilisant la formule sommatoire de Poisson qui relie deux séries, l'une portant sur une fonction $f(x)$ et l'autre sur sa transformée de Fourier $\hat{f}(k)$ [123] :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{f}(n) = 2\pi \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(2\pi n), \quad (4.8.18)$$

où la transformée de Fourier est ici :

$$\hat{f}(k) = \int dx e^{-ikx} f(x). \quad (4.8.19)$$

Si la fonction f est une gaussienne, sa transformée de Fourier est également une gaussienne :

$$f(x) = e^{-\frac{ux^2}{4\pi}} \quad ; \quad \hat{f}(k) = \frac{2\pi}{\sqrt{u}} e^{-\frac{\pi k^2}{u}}, \quad (4.8.20)$$

et l'utilisation de la formule sommatoire de Poisson pour ces fonctions gaussiennes permet de trouver l'égalité remarquable :

$$\Theta(x) = \frac{1}{\sqrt{x}} \Theta\left(\frac{1}{x}\right) \quad \text{avec} \quad \Theta(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-n^2\pi x}. \quad (4.8.21)$$

On peut ainsi développer la somme :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-n^2 u} = \sqrt{\frac{\pi}{u}} + \mathcal{O}_{u \rightarrow 0}\left(\frac{e^{-1/u}}{\sqrt{u}}\right). \quad (4.8.22)$$

Condition de contact. Finalement, le développement de $\langle \delta_\epsilon | \Psi_\epsilon \rangle$ donne :

$$\langle \delta_\epsilon | \Psi_\epsilon \rangle = \mathcal{S} \left[\frac{-\pi \coth(\pi b)}{b} + 2\sqrt{\pi}\sigma - b\pi \coth(\pi b)\sigma^2 + \frac{4}{3}\sqrt{\pi}b^2\sigma^3 + \mathcal{O}_{\sigma \rightarrow 0}(\sigma^4) \right]. \quad (4.8.23)$$

En utilisant la relation entre ϵ et son équivalent adimensionné σ : $(\sqrt{2\pi}/L)\partial_\sigma = \partial_\epsilon$, l'application de la condition (1.6.12) utilisant l'opérateur frontière (4.8.4) donne une équation vérifiée par le nombre d'onde b :

$$0 = \coth(b\pi) - a_0 \frac{2\pi b}{L} - R_0^3 \left(\frac{2\pi b}{L}\right)^3. \quad (4.8.24)$$

Solutions. Un prolongement analytique permet de trouver l'équation vérifiée par les états d'énergie relative E positive.

$$\begin{cases} 0 = \coth\left(\frac{qL}{2}\right) - a_0 q - R_0^3 q^3, & \text{pour } E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2\mu} \\ 0 = -\cot\left(\frac{kL}{2}\right) - a_0 k + R_0^3 k^3, & \text{pour } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}. \end{cases} \quad (4.8.25)$$

Tout comme lorsqu'il n'y a pas de boîte, il existe toujours un unique état lié à deux corps lorsque $R_0 > 0$. Les niveaux d'énergie calculés à partir des équations (4.8.25) sont tracés sur la figure 4.5.

4.8.3 État fondamental de trois bosons dans une boîte

Généralités. On considère maintenant le problème de trois bosons dans la même boîte de longueur L et nous utilisons les conventions :

$$\langle z | k_i \rangle = \frac{e^{ik_i z}}{\sqrt{L}} \quad ; \quad k_i = \frac{2n_i\pi}{L}, \quad \text{avec } n_i \in \mathbb{Z}, \quad \text{pour } i = 1, 2, 3. \quad (4.8.26)$$

Nous nous plaçons dans le référentiel du centre de masse et nous définissons les nombres d'onde relatif et du centre de masse pour deux particules i et j , la dernière particule étant indicée par l :

$$\sum_{m=1}^3 k_m = 0 \quad ; \quad k_{ij} = \frac{k_i - k_j}{2} \quad ; \quad K_{ij} = k_i + k_j = -k_l, \quad (4.8.27)$$

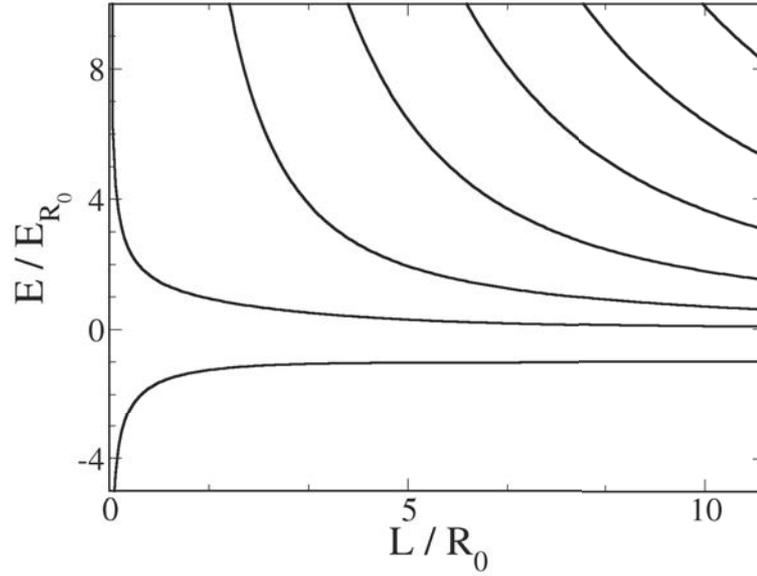


Fig. 4.5 Niveaux d'énergie de deux particules (4.8.25) dont le centre de masse est au repos dans une boîte unidimensionnelle de longueur L pour $a_0 = 0$ et $E_{R_0} = \hbar^2/(2\mu R_0^2)$. L'énergie de l'unique état lié tend vers $-E_{R_0}$ lorsque $L \rightarrow \infty$ qui est l'énergie de l'état lié dans le milieu infini.

ce qui permet d'écrire :

$$\sum_{m=1}^3 \frac{k_m^2}{2} = \frac{3}{4}k_l^2 + k_{ij}^2. \quad (4.8.28)$$

En représentation en impulsion, l'équation de Schrödinger est :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^3 k_i^2 - E \right) \langle k_1, k_2, k_3 | \Psi_\epsilon \rangle = - \sum_{i < j} S(K_{ij}) \frac{\chi_\epsilon(k_{ij})}{\sqrt{L}} \delta_{n_1+n_2+n_3,0}, \quad (4.8.29)$$

où la symétrie bosonique impose que S soit la même fonction quelle que soit la paire atomique considérée. Pour des atomes piégés dans une boîte il n'y a pas de continuum et cette relation peut être inversée en supposant que $E \neq \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^3 k_i^2$. La fonction d'onde peut s'écrire sous la forme d'une somme de trois termes :

$$\Psi_\epsilon(k_1, k_2, k_3) = \sum_{p=1}^3 \Psi_\epsilon^p(k_1, k_2, k_3), \quad (4.8.30)$$

qui s'expriment pour des états d'énergie négative $E = \frac{-\hbar^2 q^2}{m}$:

$$\Psi_\epsilon^p(k_1, k_2, k_3) = \frac{m}{\hbar^2 \sqrt{L}} \frac{-S(k_p) \chi_\epsilon(k_{ij})}{\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) + q^2} \times \delta_{n_1+n_2+n_3,0}, \quad (4.8.31)$$

où (i, j, p) forment une permutation circulaire des indices $(1, 2, 3)$.

Condition de contact. Considérant le contact entre les particules 1 et 2, on s'intéresse à la quantité :

$$\langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon \rangle = \langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon^1 \rangle + \langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon^2 \rangle + \langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon^3 \rangle, \quad (4.8.32)$$

où le ket $|12 : \delta_\epsilon, k_3\rangle$ représente une onde plane de nombre d'onde K_{12} pour le centre de masse des particules 1 et 2, une onde plane de nombre d'onde k_3 pour la particule 3 et l'état l'état $|\delta_\epsilon\rangle$ pour la particule relative de la paire (12) :

$$\langle 12 : \delta_\epsilon | k_1, k_2 \rangle = \chi_\epsilon(k_{12}) |K_{12}\rangle. \quad (4.8.33)$$

En insérant la relation de fermeture sur k_1 et k_2 :

$$\sum_{n_1=-\infty}^{\infty} |k_1\rangle \langle k_1| = \mathbb{1} \quad ; \quad \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} |k_2\rangle \langle k_2| = \mathbb{1}, \quad (4.8.34)$$

on trouve :

$$\langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon^1 \rangle = \frac{m}{L\hbar^2} \sum_{n_1} \frac{-S(k_1) \chi_\epsilon \left(k_1 + \frac{k_3}{2}\right) \chi_\epsilon \left(k_3 + \frac{k_1}{2}\right)}{k_1^2 + k_3^2 + k_1 k_3 + q^2} = \langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon^2 \rangle \quad (4.8.35)$$

$$\langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon^3 \rangle = -S(k_3) \frac{m}{L\hbar^2} \sum_{n_1} \frac{\chi_\epsilon^2 \left(k_1 + \frac{k_3}{2}\right)}{\left(k_1 + \frac{k_3}{2}\right)^2 + \frac{3}{4}k_3^2 + q^2}. \quad (4.8.36)$$

Avant de pouvoir appliquer la condition de contact, il faut connaître le comportement de ces trois fonctions pour des ϵ petits. La fonction $S(k)$ est supposée avoir une décroissance rapide pour $n \rightarrow \infty$ (au moins aussi rapide que k^{-4}), ce que l'on vérifiera *a posteriori*. Cette condition correspond à la condition de filtrage (voir le paragraphe 4.6.4) qui permet de retrouver l'équation intégrale déduite d'un modèle à deux voies.

Les deux séries des équations (4.8.35) et (4.8.36) ont des comportements différents. La série de fonctions (4.8.35), ainsi que ses 3 premières dérivées termes à termes, convergent uniformément. Lors de l'utilisation de l'opérateur frontière, on pourra alors intervertir les symboles $(\partial_\epsilon$ et $\sum)$, $(\partial_\epsilon^3$ et $\sum)$ et $(\lim_{\epsilon \rightarrow 0}$ et $\sum)$. Le développement de Taylor de la fonction $\chi_\epsilon(k)$ ne comporte que des termes de puissances paires : lors de l'application de l'opérateur frontière, seul le terme d'ordre zéro contribue.

Il n'est pas possible d'effectuer de telles interversions dans l'équation (4.8.36). On peut néanmoins réécrire cette somme :

$$\langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon^3 \rangle = -\mathcal{S} \sum_n \frac{e^{-\sigma^2 \left(n + \frac{n_3}{2}\right)^2}}{\left(n + \frac{n_3}{2}\right)^2 + b_{\text{col}}^2}, \quad (4.8.37)$$

avec

$$\mathcal{S} = \frac{mL}{\hbar^2 (2\pi)^2} S(n_3) \quad ; \quad b_{\text{col}}^2 = \frac{L^2 q^2}{(2\pi)^2} + \frac{3}{4} n_3^2 \quad ; \quad \sigma = \frac{\sqrt{2}\pi\epsilon}{L}. \quad (4.8.38)$$

À un changement d'indice près, l'étude du développement de la somme de l'équation (4.8.37) se ramène à l'étude de deux cas, selon la parité du nombre n_3 :

$$\langle 12 : \delta_\epsilon, n_3 = 2p_3 | \Psi_\epsilon^3 \rangle = -\mathcal{S} \sum_n \frac{e^{-\sigma^2 n^2}}{n^2 + b_{\text{col}}^2} \quad (4.8.39)$$

$$\langle 12 : \delta_\epsilon, n_3 = 2p_3 + 1 | \Psi_\epsilon^3 \rangle = -\mathcal{S} \sum_n \frac{e^{-\sigma^2 (n + \frac{1}{2})^2}}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + b_{\text{col}}^2}. \quad (4.8.40)$$

Ces deux cas peuvent être traités en utilisant le développement de la partie précédente [cf l'équation (4.8.22)]. En effet, pour une fonction quelconque f , une réindexation des termes de la somme permet de montrer, sous réserve que tous les termes existent, que :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f \left[\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f \left(\frac{1}{4} n^2 \right) - \sum_{n=-\infty}^{\infty} f \left(n^2 \right). \quad (4.8.41)$$

La remarque de l'équation (4.8.41) nous permet d'utiliser les résultats précédents (4.8.22) pour la série (4.8.40) On trouve finalement, dans ces deux sous-cas, le même développement :

$$\langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon^3 \rangle = -\mathcal{S} \left(\sum_n \frac{1}{\left(n + \frac{n_3}{2}\right)^2 + b_{\text{col}}^2} - 2\sqrt{\pi}\sigma - \frac{4}{3}\sqrt{\pi}b_{\text{col}}^2\sigma^3 \right) + \mathcal{O}_{\sigma \rightarrow 0}(\sigma^4), \quad (4.8.42)$$

où le terme en σ^2 a été omis car il ne contribue pas lors de l'application de l'opérateur frontière. On peut alors appliquer la condition de contact entre les particules 1 et 2 :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} B_\epsilon^{1D} \langle 12 : \delta_\epsilon, k_3 | \Psi_\epsilon \rangle = 0, \quad (4.8.43)$$

ce qui donne, en définissant $q_{\text{col}} = \frac{2\pi}{L} b_{\text{col}}$, l'équation suivante :

$$2 \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \frac{b_{\text{col}}}{\pi} \frac{S(n_1)}{\left(n_1 + \frac{n_3}{2}\right)^2 + b_{\text{col}}^2} = -S(n_3) \left[\sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \frac{\frac{b_{\text{col}}}{\pi}}{\left(n_1 + \frac{n_3}{2}\right)^2 + b_{\text{col}}^2} - a_0 q_{\text{col}} - R_0^3 q_{\text{col}}^3 \right]. \quad (4.8.44)$$

La somme de droite se calcule exactement et dépend de la parité de n_3 :

$$\sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \frac{\frac{b_{\text{col}}}{\pi}}{\left(n_1 + \frac{n_3}{2}\right)^2 + b_{\text{col}}^2} = \begin{cases} \coth(b_{\text{col}}\pi) & \text{si } n_3 \text{ est pair} \\ \tanh(b_{\text{col}}\pi) & \text{si } n_3 \text{ est impair.} \end{cases} \quad (4.8.45)$$

L'équation « intégrale discrète » (4.8.44) est l'analogue de l'équation intégrale que Skorniakov et Ter-Martirosian [124] ont démontré pour le cas de trois bosons libres dans un espace tridimensionnel interagissant avec le modèle de Wigner-Bethe-Peierls.

Dans la limite continue $L \rightarrow \infty$, la sommes de l'équation (4.8.45) tend vers 1 et on retrouve l'équation intégrale (4.5.18) du secteur pair.

Nous n'avons pas considéré le cas où l'énergie E est positive et où le nombre d'onde q est remplacé par $-ik$. L'énergie de collision $E_{\text{col}} = \frac{-\hbar^2 q_{\text{col}}^2}{m}$ peut alors devenir positive. Il s'agira alors de remplacer b_{col} par $-ib_{\text{col}}$.

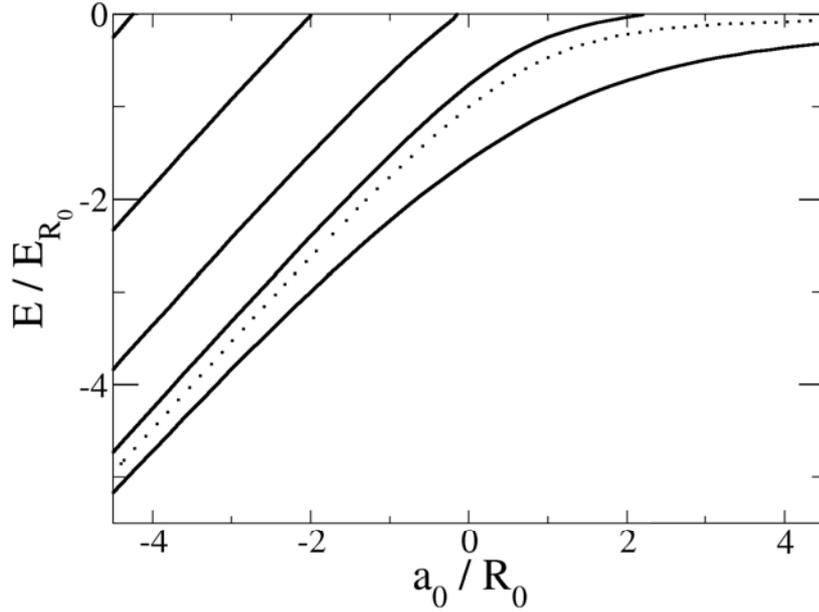


Fig. 4.6 Pointillés : niveau d'énergie négatif pour un système de deux particules (4.8.25) dans une même boîte unidimensionnelle de longueur $L = 10R_0$; ligne : niveaux d'énergie négatifs pour un système de trois bosons (4.8.44) dans la même boîte ; $E_{R_0} = \hbar^2/(mR_0^2)$.

Résolution de l'équation matricielle. L'équation (4.8.44) peut s'écrire exactement sous la forme d'une équation matricielle de taille infinie :

$$[M(q_{\text{col}})][S] = 0, \quad (4.8.46)$$

où le vecteur unidimensionnel $[S]$ contient les valeurs de $S(n)$ de façon à ce que $[S]_i = S(i)$. La matrice $[M(q_{\text{col}})]$ est alors définie par :

$$[M(q_{\text{col}})]_{n_1, n_3} = 2 \frac{\frac{b_{\text{col}}}{\pi}}{\left(n_1 + \frac{n_3}{2}\right)^2 + b_{\text{col}}^2} \delta_{n_1, n_1} + \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\frac{b_{\text{col}}}{\pi}}{\left(n + \frac{n_3}{2}\right)^2 + b_{\text{col}}^2} - a_0 q_{\text{col}} - R_0^3 q_{\text{col}}^3 \right] \delta_{n_1, n_3}, \quad (4.8.47)$$

où les indices n_1 et $n_3 \in \mathbb{Z}$. Pour trouver numériquement les énergies collisionnelles réduites b_{col} propres du système, on trace les valeurs propres de la matrice $[M]$ en fonction du paramètre b_{col} , ce qui matérialise une série de branches. Les énergies cherchées sont alors données par le croisement entre l'une de ces branches et l'axe des abscisses.

Finalement, les niveaux d'énergie négatifs pour ce système de trois bosons sont tracés dans la figure 4.6.

Annexe du chapitre 4

4.A Intégrabilité et ansatz de Bethe

Considérons un système intégrable unidimensionnel de N particules de masse m . Lors d'une collision, les atomes ne peuvent qu'échanger leurs nombres d'onde deux à deux. Dans la région asymptotique où les particules sont éloignées les unes des autres d'une distance supérieure à la portée du potentiel d'interaction, on peut considérer que les atomes forment un ensemble d'onde plane possédant un ensemble fixé de nombres d'onde $(k)_N$. La fonction d'onde de ce système peut alors s'écrire comme [20] :

$$\langle (z)_N | \Psi \rangle \sim \sum_{P \in \mathfrak{S}} a(P) \exp \left(i \sum_{j=1}^N k_{P(j)} z_j \right). \quad (4.A.1)$$

Dans l'équation (4.A.1), le groupe des permutations est noté \mathfrak{S} . L'énergie E est reliée aux nombres d'onde réels $(k)_N$ par :

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N k_j^2 \quad (4.A.2)$$

et les amplitudes $a(P)$, qui dépendent de l'interaction, sont en pratique déterminées grâce aux conditions de contact. Cette forme de fonction d'onde est connue sous le nom d'ansatz de Bethe et a permis de résoudre exactement plusieurs problèmes unidimensionnels à N corps depuis sa première utilisation pour résoudre le modèle de Heisenberg de spin 1/2 [125] jusqu'à aujourd'hui [126].

Cet ansatz ne peut décrire que des états de diffusion – pour des nombres d'onde réels, l'énergie ne peut être que positive. Il est cependant possible d'étendre cet ansatz pour des états liés en considérant des nombres d'onde complexes de façon à ce que l'énergie puisse devenir négative (tout en s'assurant qu'elle reste réelle) [104] :

$$k_j \rightarrow K_j = k_j + i\kappa_j \quad ; \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \left(k_j^2 - \kappa_j^2 + 2i\kappa_j k_j \right). \quad (4.A.3)$$

Pour un ensemble de N particules de masse m dont l'interaction est décrite par une condition de contact du type Wigner-Bethe-Peierls dans le secteur pair avec une longueur de diffusion a_0 positive (donc en présence d'un état lié à deux corps), cette méthode a permis de retrouver l'énergie de l'état fondamental prédite dans les années

60 par McGuire [74] :

$$E_{McG} = \frac{-\hbar^2}{6ma_0^2} N(N^2 - 1), \quad (4.A.4)$$

la fonction d'onde solitonique associée :

$$\langle (z)_N | \Psi \rangle = \mathcal{N} \exp \left(-\frac{1}{a_0} \sum_{1 \leq i < j \leq N} |z_i - z_j| \right) \quad (4.A.5)$$

ainsi que le spectre des excitations qui correspondent à l'éjection d'une ou plusieurs particules du soliton [104].

Dans le cas où le système n'est pas intégrable, l'ensemble des nombres d'onde n'est pas fixé et la fonction d'onde peut s'écrire dans la région asymptotique comme la somme de deux termes [101] :

$$\begin{aligned} \langle (z)_N | \Psi \rangle \sim \sum_{P \in \mathfrak{S}} a(P) \exp \left(i \sum_{j=1}^N k_{P(j)} z_j \right) \\ + \int d^N k' S_{\text{diff}}[(k')_N, (k)_N] \exp \left(i \sum_{j=1}^N k'_j z_j \right). \end{aligned} \quad (4.A.6)$$

Dans l'équation (4.A.6), le terme de droite est appelé partie diffractive et provient du fait que le système n'est pas intégrable.

Article 2 : One-dimensional ultracold atomic gases : impact of the effective range on the integrability



Fig. 4.7 Schéma de la collision entre la tour 12 et la tour 13, LPTMC, campus Jussieu.



One-dimensional ultracold atomic gases: impact of the effective range on integrability

Tom Kristensen, Ludovic Pricoupenko

► **To cite this version:**

Tom Kristensen, Ludovic Pricoupenko. One-dimensional ultracold atomic gases: impact of the effective range on integrability. 2015. <hal-01162510>

HAL Id: hal-01162510

<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01162510>

Submitted on 10 Jun 2015

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.

One-dimensional ultracold atomic gases: impact of the effective range on integrability

Tom Kristensen^{1,2} and Ludovic Pricoupenko^{1,2}

1- Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, UMR 7600,

Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, F-75005, Paris, France

2- CNRS, UMR 7600, Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, F-75005, Paris, France

(Dated: June 12, 2015)

The one-dimensional one-component Bose and Fermi gases are considered in a regime of large effective range. We focus our study on the three-body problem, which is at the heart of the integrability issue. For fermions, the vicinity of the integrability is characterized by large deviations with respect to the predictions of the Bethe ansatz. For the consistency of the contact model, it appears essential to take into account the contact of three particles.

PACS numbers: 05.30.Fk, 05.30.Jp, 03.75.-b, 67.85.-d

The one-dimensional (1D) Bose and Fermi gases with zero-range interactions are celebrated examples of exactly solvable many-body problems [1–4]. Ultracold atoms offer the stupendous possibility to achieve these systems in the degenerate regime by using highly elongated cigar traps [5–7]. Moreover, using magnetic Feshbach resonances and/or tuning the trap parameters make it possible to study 1D systems in strongly correlated regimes. This way, the Tonks-Girardeau and the super Tonks-Girardeau phases have been achieved [8–12]. In addition, the existence of confinement induced resonances and resonances shifts have been confirmed [13, 14]. Analogously to the three-dimensional case [15–17], it has been shown recently that considering a large 1D effective range parameter permits one to enrich the phase diagram of the Bose and Fermi 1D degenerate gases [18, 19]. For bosons, this regime is achieved for narrow resonances i.e., in the limit of small Feshbach coupling between atoms and diatomic molecules [20]. For fermions, the p -wave scattering resonance is intrinsically narrow and this regime can be easily reached [21]. Using a contact model (CM), it was shown for one-component fermions in Ref. [18] and for identical bosons in Ref. [19] that the eigenstates of these systems are given by the Bethe ansatz (BA) and are thus integrable. This result is in strong contradiction with the Mc Guire-Yang-Baxter criterion which when applied in this regime shows diffractive effects in multiple scattering [2, 22]. Hence integrability is inherently not possible.

In this letter we consider the three-body problem, which is intimately related to the integrability issue [4]. To this end we use a Hamiltonian two-channel model (HTCM), which encapsulates the Feshbach mechanism. Whereas the CM and the HTCM are strictly equivalent at the two-body level, in the three-body problem the HTCM gives large deviations with respect to the predictions based on the BA. We show that in the limit of the contact of three particles, all the solutions of the HTCM have the same type of singularity not satisfied by the BA. The behavior of the wave function in the limit where the three particles fall one on the others appears then as a key ingredient in the violation of the integrability. We show that equivalence of the CM and of the HTCM can

be achieved at the three-body level by imposing continuity conditions on the wave function.

Our modeling is based on a parameterization of the two-body 1D asymptotic scattering state including the effective range term. For an incoming wave of relative wave number k_0 and relative coordinate z , we write it as

$$\langle z | \psi_{k_0} \rangle = e^{ik_0 z} + [f_0(k_0) + \text{sgn}(z)f_1(k_0)]e^{ik_0|z|}. \quad (1)$$

In Eq. (1), f_0 (respectively f_1) is the scattering amplitude in the even (respectively odd) sector, parameterized as

$$f_\eta(k_0) = \frac{-(ik_0 a_\eta)^\eta}{1 + ik_0 a_\eta + b_\eta (ik_0)^{3-\eta} (-a_\eta)^\eta}. \quad (2)$$

For ultracold atoms in a 1D waveguide, the scattering lengths a_η and the effective range parameters b_η in Eq. (2) can be expressed as a function of 3D scattering parameters in the homogeneous space [23–30]. In what follows, we consider only positive values of the effective range parameter $b_\eta > 0$, an assumption justified in the limit of narrow resonances [20, 21]. The existence of a dimer in the system is particularly relevant in the context of the integrability. From the analyticity of the scattering amplitude, one finds a single bound state i.e., a dimer $|\phi_\eta\rangle$ of energy $-\hbar^2 \kappa_\eta^2 / m$ in the even sector for all values of a_0 and in the odd sector only for positive values of a_1

$$\langle z | \phi_\eta \rangle = \sqrt{\kappa_\eta} (1 + 2b_\eta \kappa_\eta^{3-2\eta})^{-1/2} [1 - 2\eta\theta(z)] e^{-\kappa_\eta|z|} \quad (3)$$

where $\theta(z)$ is the Heaviside function and in the odd sector ($\eta = 1$), one recognizes the sign function $\text{sgn}(z) = 2\theta(z) - 1$. The dimer binding wave number κ_η in Eq. (3) is the positive root of

$$1 - a_\eta \kappa_\eta - b_\eta (a_\eta)^\eta \kappa_\eta^{3-\eta} = 0. \quad (4)$$

We now come to the integrability issue for a system of N one-component bosons (respectively fermions) where the two-body scattering occurs only in the even (respectively in the odd) sector [31]. Integrability means that the eigenstates are given by the BA and there is thus no diffractive scattering i.e., the wave numbers of

the particles are globally conserved after multiple collisions in the system [4]. The expressions of the transmission and reflection (corresponding to the exchange of momentum between the particles) coefficients in the scattering of two particles are thus particularly relevant. From Eq. (1), considering a pair of particles (i, j) of wave numbers (k_i, k_j) , they are related to the scattering amplitudes by $t_\eta^{ij} = 1 + f_\eta((k_i - k_j)/2)$ and $r_\eta^{ij} = (-1)^\eta f_\eta((k_i - k_j)/2)$. A necessary condition for integrability is given by the Mc Guire-Yang-Baxter criterion, which follows from the absence of diffractive scattering in the three-body integrable problem [2, 22]:

$$r_\eta^{12} r_\eta^{13} t_\eta^{23} + t_\eta^{12} r_\eta^{13} r_\eta^{23} = r_\eta^{23} t_\eta^{13} r_\eta^{12}. \quad (5)$$

For $\eta = 0$ this last equality is verified iff $b_0 = 0$ (Lieb Liniger model) and for $\eta = 1$ iff $|a_1| = \infty$ i.e., in the Fermi Tonks-Girardeau (FTG) regime [34, 35]. This is in strong contradiction with the results of Refs. [18, 19] where the BA was used as an eigenstate of contact models in regimes where Eq. (5) is not satisfied [36]. To understand this discrepancy, in the rest of this letter we focus on the three-body problem which has the advantage of the simplicity while being a cornerstone of the integrability.

We first use a CM which includes the effective range as a straightforward generalization of the Lieb Liniger model [20, 21]. It is analogous to the one used in the context of narrow Feshbach resonances for atoms in the three dimensional space [15, 38, 39]. For convenience we introduce the shorthand notation $(z)_N \equiv (z_1, z_2, \dots, z_N)$ for the N coordinates of the system and $z_{ij} = z_i - z_j$ for the relative coordinate of the pair of particles (ij) . The CM is defined as follows: firstly, for all the configurations where $\forall i \neq j, z_i \neq z_j$, the wave function $\langle (z)_N | \Psi \rangle$ verifies the Schrödinger equation without any interaction between particles; secondly, for each pair of interacting particles (ij) the wave function verifies the contact condition

$$\lim_{z_{ij} \rightarrow 0^+} \left(1 + a_\eta \partial_{z_{ij}} + (-a_\eta)^\eta b_\eta \partial_{z_{ij}}^{3-\eta} \right) \langle (z)_N | \hat{\Pi}_\eta^{ij} | \Psi \rangle = 0 \quad (6)$$

where for $\eta = 0$ (respectively for $\eta = 1$) the operator $\hat{\Pi}_\eta^{ij}$ symmetrizes (respectively antisymmetrizes) the state $|\Psi\rangle$ in the exchange of the particles i and j . In Eq. (6), the positions $Z_{ij} = (z_i + z_j)/2$ and z_k ($k \neq i, j$) are kept fixed [40]. One can verify that the exact expressions of the scattering amplitudes in Eq. (2) are deduced from the contact conditions of Eq. (6) by using the wave-function of Eq. (1). If a dimer exists and the system is integrable, then the ground state for three particles is a trimer of energy $-4\hbar^2 \kappa^2/m$ given by the BA [2]

$$\langle z_1, z_2, z_3 | \psi_\eta^{\text{p,BA}} \rangle = e^{-\kappa \sum_{i < j} |z_{ij}|} \prod_{i < j} [1 - 2\eta \theta(z_{ij})]. \quad (7)$$

Following the standard method in Refs [1, 41], one considers the contact condition in Eq. (6) for each pair (ij)

in domains where the third particle k is distinct from the center of mass Z_{ij} (i.e., $z_k \neq Z_{ij}$). Surprisingly, following this reasoning the BA appears as a solution of the contact model with $\kappa = \kappa_\eta$ and the binding wavenumber of the trimer $q_\eta^{\text{t,BA}} = 2\kappa_\eta$, thus in deep contradiction with the Mc Guire-Yang-Baxter criterion.

The consistency of the CM is thus puzzling and to go further we now use a HTCM which is a more conventional approach. In this model, the scattering process between two particles of mass m is only due to the coherent coupling between the pair of particles and a molecular state of mass $2m$. For a plane wave of wave number k , we choose the convention $\langle z | k \rangle = \exp(ikz)$ and we denote the creation operator in the open channel $\hat{a}_{\eta,k}^\dagger$, where $\eta = 0$ for bosons and $\eta = 1$ for fermions. The creation operator for molecules in the closed channel is denoted by $\hat{b}_{\eta,k}^\dagger$, where the index η permits one to distinguish the composite boson (i.e., the molecule) made of two fermions, from the molecule made of two bosons. We consider only pure systems with identical particles and for each system ($\eta = 0$ or $\eta = 1$), the Hamiltonian is

$$\hat{H}_\eta = \int \frac{dk}{2\pi} \left[\epsilon_k \hat{a}_{\eta,k}^\dagger \hat{a}_{\eta,k} + \left(\frac{\epsilon_k}{2} + E_\eta^{\text{m}} \right) \hat{b}_{\eta,k}^\dagger \hat{b}_{\eta,k} \right] + \left[\frac{\hbar^2 \lambda_\eta}{m} \int \frac{dK dk}{(2\pi)^2} \langle k | \delta_\epsilon^\eta \rangle \hat{a}_{\eta, \frac{\kappa}{2} + k}^\dagger \hat{a}_{\eta, \frac{\kappa}{2} - k}^\dagger \hat{b}_{\eta, K} + \text{h.c.} \right] \quad (8)$$

In Eq. (8) $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ is the single particle kinetic energy, λ_η is the strength of the coherent coupling between the two channels and E_η^{m} is the internal energy of the molecular state. The function $\langle k | \delta_\epsilon^\eta \rangle$ in the second line of Eq. (8) is a cut-off for the inter-channel coupling

$$\langle k | \delta_\epsilon^\eta \rangle = (ik)^\eta e^{-k^2 \epsilon^2/4}. \quad (9)$$

Physically, the short-range parameter ϵ represents the length scale below which the collisional properties have a 3D character. For atoms moving in the monomode regime of a 1D harmonic waveguide of atomic frequency ω_\perp , it is typically of the order of the transverse length $a_\perp = \sqrt{\hbar/(m\omega_\perp)}$. At this scale the 1D effective model of Eq. (8) is no more relevant. This explains the fundamental interest of considering the zero-range limit ($\epsilon \rightarrow 0$) which permits one to capture the universal 1D properties for energies much smaller than the level spacing in the waveguide i.e., $\hbar^2/(ma_\perp^2)$. In the zero-range limit, the scattering lengths and the effective range parameters of the HTCM are given by

$$a_0 = \frac{mE_0^{\text{m}}}{\hbar^2 |\lambda_0|^2}; a_1 \underset{\epsilon \rightarrow 0}{=} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{1}{\epsilon} - \frac{mE_1^{\text{m}}}{\hbar^2 |\lambda_1|^2}}}; b_\eta = \frac{1}{|\lambda_\eta|^2}. \quad (10)$$

The molecular energy in the odd sector (E_1^{m}) is a bare parameter which diverges in the zero-range limit in such a way that a_1 keeps a desired finite value, whereas the parameters E_0^{m} and λ_η stay finite in this limit. In the HTCM, a three-body state is the coherent superposition

of a particle state (denoted by $|\psi_\eta^p\rangle$) in the open channel and of a mixed channel state (denoted by $\sqrt{3!}|\psi_\eta^m\rangle/\lambda_\eta$). In the center of mass frame, it can be written as

$$|\Psi_\eta\rangle = \int \frac{dkdK}{(2\pi)^2} \frac{\langle k, K|\psi_\eta^p\rangle}{\sqrt{3!}} \hat{a}_{\eta, \frac{K}{2}+k}^\dagger \hat{a}_{\eta, \frac{K}{2}-k}^\dagger \hat{a}_{\eta, -K}^\dagger |0\rangle + \int \frac{dK}{(2\pi)} \frac{\langle K|\psi_\eta^m\rangle\sqrt{3!}}{\lambda_\eta} \hat{b}_{\eta, K}^\dagger \hat{a}_{\eta, -K}^\dagger |0\rangle. \quad (11)$$

For a positive energy ($E > 0$), $|\Psi_\eta\rangle$ is a scattering state and we denote the three-particle incoming state by $|\psi_\eta^0\rangle$. In Eq. (11) $\langle k, K|\psi_\eta^p\rangle$ is symmetric (for $\eta = 0$) or antisymmetric (for $\eta = 1$) in the exchange of two particles i.e., in the transformation ($k \rightarrow -k$) or ($k \rightarrow k_\pm = -\frac{3K}{4} \pm \frac{k}{2}$; $K \rightarrow K_\pm = -\frac{K}{2} \mp k$). The projection of the Schrödinger equation at energy E onto the open channel gives

$$(E - \frac{3\epsilon_K}{2} - 2\epsilon_k)\langle k, K|\psi_\eta^p\rangle = \frac{2\hbar^2}{m} [\langle k|\delta_\epsilon^\eta\rangle\langle K|\psi_\eta^m\rangle + \langle -k_+|\delta_\epsilon^\eta\rangle\langle K_+|\psi_\eta^m\rangle + \langle k_-|\delta_\epsilon^\eta\rangle\langle K_-|\psi_\eta^m\rangle]. \quad (12)$$

In the zero-range limit, the cut-off function in the configuration space $\langle z|\delta_\epsilon^0\rangle$ [respectively $\langle z|\delta_\epsilon^1\rangle$] tends to the δ distribution denoted by $\delta^0(z)$ [respectively to its first derivative denoted by $\delta^1(z)$]. Hence Eq. (12) gives the singular behavior of the particle wave function at the contact of two particles. For a pair (ij) located at the distance $Z = Z_{ij} - z_k$ from the third particle k , one has

$$\partial_{z_{ij}}^2 \langle z_{ij}, Z|\psi_\eta^p\rangle = 2\delta^\eta(z_{ij})\langle Z|\psi_\eta^m\rangle + \text{'non } \delta \text{ terms'} \quad (13)$$

Using Eq. (13), the mixed channel wave function associated with the BA in Eq.(7) is given by [42]

$$\langle Z|\psi_\eta^{\text{m,BA}}\rangle = -\kappa_\eta^{1-\eta} [1 - 2\eta\theta(Z)]^2 e^{-2\kappa_\eta|Z|} \quad (14)$$

and in the momentum representation

$$\langle K|\psi_\eta^{\text{m,BA}}\rangle = -4\kappa_\eta^{2-\eta}(4\kappa_\eta^2 + K^2)^{-1}. \quad (15)$$

Importantly, for fermions the mixed channel wave function in Eq. (14) is discontinuous at the three-body contact [$\text{sgn}(0) = 0$ and thus $\langle Z = 0|\psi_1^{\text{m,BA}}\rangle = 0$]. Combining Eq. (12) with the projection of the Schrödinger equation onto the one atom plus one molecule space, one obtains in the zero-range limit a 1D STM equation [43]

$$\frac{(ik_K^{\text{rel}})^{2\eta-1}\langle K|\psi_\eta^m\rangle}{f_\eta(k_K^{\text{rel}})} + \int \frac{dk}{2\pi} \mathcal{M}_\eta(K, k, E)\langle k|\psi_\eta^m\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} (-ik)^\eta \langle k, K|\psi_\eta^0\rangle. \quad (16)$$

In Eq. (16) we have introduced the kernel

$$\mathcal{M}_\eta(K, k, E) = \frac{4(k + K/2)^\eta(K + k/2)^\eta}{-\frac{m}{\hbar^2}(E + i0^+) + K^2 + kK + k^2} \quad (17)$$

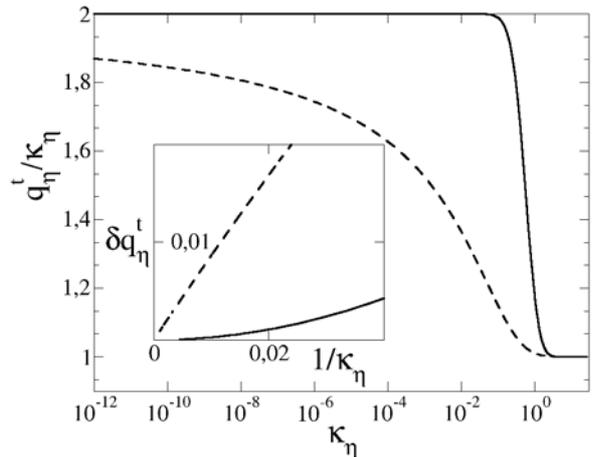


FIG. 1: Spectrum of the trimers as a function of the wave number of the dimer in units of b_η . Continuous line: bosons ($\eta = 0$), dashed line: fermions ($\eta = 1$). Inset: detail of the region where $q_\eta^t \sim \kappa_\eta$ and $\delta q_\eta^t = 2\sqrt{(q_\eta^t)^2 - \kappa_\eta^2}/3$ is plotted in units where b_η equals one.

and the relative momentum $k_K^{\text{rel}} = \sqrt{\frac{mE}{\hbar^2} - \frac{3}{4}K^2}$, where for a negative argument of the square root one uses the standard analytic continuation in scattering theory i.e., $\sqrt{-q^2} = -i|q|$. For a state of negative energy ($E < 0$), there is no incoming three-particle state ($|\psi_\eta^0\rangle = 0$) and the prescription $E \rightarrow E + i0^+$ in Eq. (17) can be omitted. For $b_\eta \neq 0$, one can deduce from Eq. (16) the large momentum behavior ($|K| \rightarrow \infty$) of the mixed channel wave function solution of the problem as a function of its value at the contact of the three particles:

$$\langle K|\psi_\eta^m\rangle \sim \frac{8}{3(-2)^\eta} \frac{\langle Z = 0^+|\psi_\eta^m\rangle + \langle Z = 0^-|\psi_\eta^m\rangle}{b_\eta K^{4-2\eta}}. \quad (18)$$

We are now ready to compare the trimers obtained from Eq. (16) with the BA. It is clear that for $b_\eta \neq 0$, the BA in Eq. (14) and Eq. (15) does not fulfill the correct asymptotic behavior in Eq. (18) which confirms the non-integrability. For bosons, this result was found in a model including also the direct particle-particle interaction [44]. The fact that for fermions, the three-body problem is ill-defined when both $b_1 = 0$ and the numerator of Eq. (18) is not zero, shows also that the BA in Eq. (15) can never be an exact solution of Eq. (16) [45]. This can be shown as follows: firstly, for $\eta = 1$ and $b_1 = 0$ at large momentum, Eq. (16) is scale invariant and the mixed channel wave function can be searched as a power law: $\langle K|\psi_\eta^m\rangle \propto K^s$; secondly, the integral in the first line of Eq. (16) is definite at least if $s < -1$; thirdly, implementing the limit of large momentum in Eq. (16) one finds $\langle K|\psi_\eta^m\rangle \propto 1/K$ unless the numerator of Eq. (18) equals zero, which completes the proof. Similarly to the integrable case, we have found numerically that whenever a dimer exists, there exists also one and only one trimer characterized by an even symmetry (i.e., $\langle K|\psi_\eta^m\rangle = \langle -K|\psi_\eta^m\rangle$). We denote the trimer energy

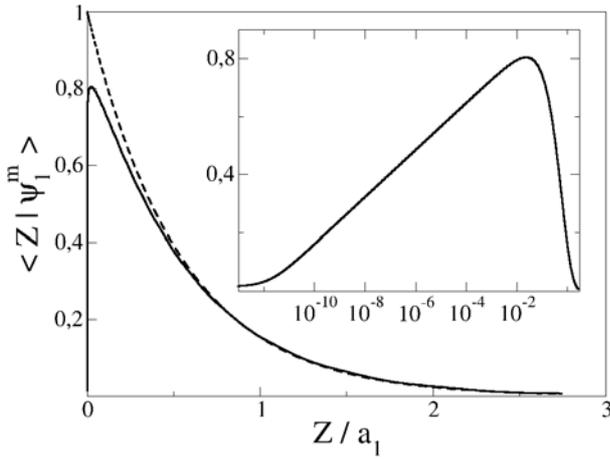


FIG. 2: Mixed channel wave function for the fermionic trimer ($\eta = 1$) for ($a_1 = 10^{12}b_1$). Continuous line: plot of the solution of Eq. (16) in the configuration space; dashed line: BA mixed channel state in Eq. (14) with a normalization chosen for convenience. Inset: same plot where Z/a_1 is in logarithmic scale.

by $E_\eta^t = -(\hbar q_\eta^t)^2/m$. In Fig. (1) the wave number q_η^t is plotted as a function of the dimer wave number κ_η . In the limit of large scattering length [$a_\eta \gg b_\eta^{1/(3-2\eta)}$], the binding wave number of the trimer tends to the integrable limit $q_\eta^t \sim 2\kappa_\eta \sim 2/a_\eta$. For bosons, the convergence is fast and one can verify straightforwardly that for $b_0 = 0$, Eq. (15) is the trimer solution of Eq. (16). For fermions, the convergence toward the integrable limit is very slow: one finds the approximate law $q_1^t \sim 2\kappa_1[1 + 1.86/\ln(0.466 \times b_1/a_1)]$. The shape of the mixed channel wave function converges also slowly toward the BA of Eq. (15). It is plotted in Fig. 2 for a very large value of the ratio a_1/b_1 . The use of a logarithmic scale in the inset of Fig. 2 provides a zoom of the neighborhood of the three-body contact. In this last region, the deviation with respect to the integrable

solution is large due to the discontinuity of the BA at $Z = 0$ for $\eta = 1$ in Eq. (14). In the opposite limit of a large dimer wave number, $q_\eta^t \sim \kappa_\eta$ and the mixed channel wave function tends to the expected results for a shallow two-body (i.e., atom-dimer) bound state $\langle Z | \psi_\eta^{m,BA} \rangle \sim \exp(-\delta q_\eta^t |Z|)$ and $\delta q_\eta^t = 2\sqrt{(q_\eta^t)^2 - \kappa_\eta^2}/3$. We find numerically $\delta q_0^t \sim -2.66/a_0$ for $a_0 \rightarrow -\infty$ ($\kappa_0 \sim \sqrt{-a_0/b_0}$) and $\delta q_1^t \sim 0.835 \times \sqrt{a_1/b_1^3}$ for $a_1 \rightarrow 0^+$ ($\kappa_1 \sim 1/\sqrt{a_1 b_1}$).

After this study of the three-body problem with the HTCM, we point out that making the assumption that for $b_\eta \neq 0$, $\partial_Z^{1-\eta} \langle Z | \psi_\eta^m \rangle$ is continuous at $Z = 0$ filters out the spurious behavior in the vicinity of the three-body contact. Therefore the BA, which does not belong to the correct domain cannot be an eigenstate of the system. It is then possible to derive Eq. (16) from the CM as follows. Using a standard method in contact models, one includes in the free Schrödinger equation δ source terms which are related to the two-body singularities of the wave function [43]. In our case, one obtains Eq. (12) in the exact zero-range limit ($\epsilon = 0$) and the particle wave function can be then expressed in terms of the mixed channel wave function. Equation (16) follows from the application of the contact condition Eq. (6) on this last expression.

To conclude, we have used the HTCM as a guide to define the correct domain for the free Hamiltonian of the CM in the three-body problem. This way, we conciliate these two different approaches in accordance with the Mc Guire-Yang-Baxter criterion. Exploring the phase diagram of the 1D atomic gas from small to large effective ranges is an open issue both experimentally and theoretically. Current experimental technics make it possible to explore few- and many-body properties in regimes of large effective ranges [12–14, 46, 47]. One expects large deviations from the integrable dynamical properties, observable in the thermalization or in the response functions [48–50].

-
- [1] E. H. Lieb, W. Liniger Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).
[2] J. B. Mc Guire, J. Math. Phys. **5**, 622 (1964).
[3] J. N. Fuchs, A. Recati, and W. Zwerger Phys. Rev. Lett. **93**, 090408 (2004).
[4] B. Sutherland in 'Beautiful Models, 70 Years of Exactly Solved Quantum Many-Body Problems', World Scientific Publishing (Singapore, 2007).
[5] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
[6] X.-W. Guan, M.T. Batchelor, and C. Lee, Rev. Mod. Phys. **85**, 1633 (2013).
[7] Proceedings of the school – Quantum Gases in Low Dimensions J. Phys. IV **116** (EDP Sciences, 2004, Les Ulis-France).
[8] M. Girardeau, J. Math. Phys **1**, 516 (1960).
[9] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, and S. Giorgini, Phys. Rev. Lett **95**, 190407 (2005).
[10] T. Kinoshita, T. Wenger, and D.S. Weiss, Science **305**, 1125 (2004).
[11] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G.V. Shlyapnikov, T.W. Hänsch and Immanuel Bloch, Nature (London) **429**, 277 (2004).
[12] E. Haller, M. Gustavsson, M.J. Mark, J.G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, H.-C. Nägerl, Science **325** (5945), 1224-1227 (2009).
[13] K. Günter, T. Stöferle, H. Moritz, M. Köhl, and T. Esslinger Phys. Rev. Lett. **95**, 230401 (2005).
[14] E. Haller, M.J. Mark, R. Hart, J.G. Danzl, L.Reichsöllner, V.S. Melezhik, P. Schmelcher and H.-C. Nägerl, Phys. Rev. Lett. **104**, 153203 (2010).
[15] D.S. Petrov, Phys. Rev. Lett. **93**, 143201 (2004).
[16] M. Jona-Lasinio, L. Pricoupenko and Y. Castin, Phys. Rev. A **77**, 043611 (2008).
[17] L. Pricoupenko, Phys. Rev. Lett. **110**, 180402 (2013).

- [18] A. Imambekov, A.A. Lukyanov, L.I. Glazman, and V. Gritsev, Phys. Rev. Lett. **104**, 040402 (2010).
- [19] Ran Qi and Xiwen Guan, EPL **101**, 40002 (2013).
- [20] T. Kristensen and L. Pricoupenko, Phys. Rev. A **91**, 042703 (2015).
- [21] L. Pricoupenko, Phys. Rev. Lett. **100**, 170404 (2008).
- [22] V. A. Yurovsky, M. Olshanii, and D. S. Weiss Advances in atomic, molecular and optical physics **55** (2008).
- [23] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).
- [24] B.E. Granger and D. Blume, Phys. Rev. Lett. **92**, 133202 (2004).
- [25] V. A. Yurovsky, Phys. Rev. A **71**, 012709 (2005).
- [26] J.I. Kim, J. Schmiedmayer and P. Schmelcher, Phys. Rev. A **72**, 042711 (2005).
- [27] Z. Idziaszek and T. Calarco, Phys. Rev. A **74**, 022712 (2006).
- [28] P. Naidon, E. Tiesinga, W. F. Mitchell, and P. S. Julienne, New J. Phys. **9**, 19 (2007).
- [29] S. Saeidian, V.S. Melezhik and P. Schmelcher, Phys. Rev. A **86**, 062713 (2012).
- [30] S.-G. Peng, S. Tan, and K. Jiang, Phys. Rev. Lett. **112**, 250401 (2014).
- [31] In our study, the deviation from integrability is analyzed in a strictly 1D context. In Refs. [32, 33] these deviations are due to the three-dimensional character of the waveguide in quasi 1D ultracold atomic systems.
- [32] C. Mora, R. Egger and A. O. Gogolin, Phys. Rev. A **71**, 052705 (2005).
- [33] D. S. Petrov, V. Lebedev, and J. T. M. Walraven Phys. Rev. A **85**, 062711 (2012).
- [34] M. D. Girardeau and E. M. Wright, Phys. Rev. Lett. **95**, 010406 (2005).
- [35] M. D. Girardeau, and A. Minguzzi, Phys. Rev. Lett. **96**, 080404 (2006).
- [36] The Mc Guire-Yang-Baxter criterion is also not satisfied in the 1D regime described in Ref. [37] where the BA is used.
- [37] V. Gurarie, Phys. Rev. A **73**, 033612 (2006).
- [38] L. Pricoupenko, Phys. Rev. A **73**, 012701 (2006).
- [39] L. Pricoupenko, Phys. Rev. Lett. **96**, 050401 (2006).
- [40] As in the Lieb Liniger model, one assumes that there is no particle between the particles i and j when the contact condition for the pair (ij) is performed.
- [41] Y. Castin and C. Herzog, C.R. Phys. **2**, 419 (2001).
- [42] We use the standard identities $\partial_z|z| = \text{sgn}(z)$ and $\partial_z \text{sgn}(z) = 2\delta(z)$.
- [43] G.V. Skorniakov and K.A. Ter-Martirosian, Sov. Phys. JETP **4**, 648 (1957).
- [44] V. A. Yurovsky, A. Ben-Reuven, and M. Olshanii Phys. Rev. Lett. **96**, 163201 (2006).
- [45] For $b_1 = 0$, the BA of Eq. (15) is a solution of Eq. (16) if one makes the substitution $\mathcal{M}_1(K, k, E) \rightarrow \mathcal{M}_1(K, k, E) - 2$.
- [46] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Bohn, and S. Jochim Phys. Rev. Lett. **108**, 075303 (2012).
- [47] G. Zürn *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 175302 (2013).
- [48] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, Nature **440**, 900-903 (2006).
- [49] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky, and M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **98**, 050405 (2007).
- [50] M. Colomé-Tatché, and D. S. Petrov Phys. Rev. Lett. **106**, 125302 (2011).

Chapitre 5

Coefficient du viriel

5.1 Introduction

Développement du viriel. L'étude de la relation entre la température, le volume et la quantité de matière d'un gaz est l'une des pierres angulaires de la thermodynamique. L'un des résultats les plus remarquables est qu'à faible densité, tous les gaz vérifient l'équation des gaz parfaits. Pour des pressions plus grandes, cette équation d'état doit être modifiée pour prendre en compte les interactions entre les particules qui composent le gaz, et dépend donc de la nature du gaz en question. Afin de prendre en compte l'écart à la loi des gaz parfaits, on peut développer la pression P du gaz en fonction de sa densité ρ , c'est le développement du viriel :

$$\frac{P}{k_B T} = \rho + B_2(T)\rho^2 + B_3(T)\rho^3 + \dots \quad (5.1.1)$$

Dans cette équation (5.1.1), T est la température du gaz, k_B la constante de Boltzmann et les coefficients B_i sont appelés coefficients du viriel. De la même façon qu'en mécanique classique, chaque gaz quantique peut être décrit par une équation d'état. Pour prendre en compte les interactions et les écarts à la loi des gaz parfaits dus à la statistique quantique pour un gaz monoatomique à faible densité ($\rho\lambda_{\text{dB}}^3 \ll 1$), on peut utiliser le développement du viriel suivant analogue à celui d'un gaz classique :

$$\frac{P\lambda_{\text{dB}}^3}{k_B T} = \sum_{n \geq 1} a_n (\rho\lambda_{\text{dB}}^3)^n. \quad (5.1.2)$$

Dans l'équation (5.1.2), la longueur d'onde de de Broglie des particules constituant le gaz est notée λ_{dB} . Pour des particules de masse m , cette longueur vaut :

$$\lambda_{\text{dB}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}. \quad (5.1.3)$$

Le coefficient a_n est dénommé coefficient du viriel d'ordre n et $a_1 = 1$ quels que soient les constituants. Bien que la forme du développement (5.1.2) soit toujours valable à faible densité, l'expression précise des coefficients a_n dépend de la nature et de la statistique du gaz considéré. De plus, le coefficient d'ordre n ne peut se calculer qu'en

étudiant le problème à n corps. Le développement du viriel est donc un excellent pont entre la physique à petit nombre de corps et la thermodynamique.

Ce développement est particulièrement bien adapté pour les gaz d'atomes froids où la densité est très faible. Cependant, il ne peut pas décrire des fluides quantiques dont la densité est plus importante, par exemple l'hélium liquide ou la matière nucléaire. Pour ce genre de système, il est nécessaire d'utiliser d'autres approches pour paramétrer l'équation d'état.

Problématiques. Des systèmes en dimensions réduites (stricts) ont déjà été étudiés grâce au développement du viriel [127, 38], mais à notre connaissance, aucune étude n'a été menée dans un guide d'onde. Le cas d'un gaz confiné dans un piège harmonique tridimensionnel a certes été étudié, d'abord en tant que régulateur permettant de calculer les états propres du système [128, 129], puis comme système physique [32, 130] mais toujours en tant que système tridimensionnel. En utilisant l'approximation de la densité locale¹, on peut d'ailleurs relier les coefficients du viriel dans le cas homogène (sans piège harmonique) et dans un piège harmonique 3D [33]. Cette approximation est valable si le confinement n'est pas très intense et donc si localement le gaz peut être considéré comme étant à l'équilibre. Si le confinement est très intense, on s'attend donc à ce que cette approximation ne soit plus valable.

Dans la référence [131], les auteurs étudient un gaz de fermions résonant avec un modèle à deux voies² grâce à un nouveau formalisme diagrammatique (différent de celui de [37]). Le développement du viriel pour un gaz fermionique tridimensionnel (homogène ou dans un piège isotrope) au voisinage d'une résonance de Feshbach a également été étudié avec des modèles à une voie [132, 133, 36].

L'équation d'état d'un gaz d'atomes froids est mesurable expérimentalement (voir par exemple les références [25, 24, 26]). Cela est en particulier le cas de celle d'un gaz de bosons bidimensionnel [82].

C'est dans ce contexte, et fort des études précédentes, que nous nous sommes posé deux questions non résolues :

- * Comment l'équation d'état d'un gaz quantique est-elle modifiée en présence d'un guide d'onde au delà de l'approximation de la densité locale ?
- * Quel est l'impact des molécules de Feshbach sur l'équation d'état ?

Systèmes considérés. Nous considérerons dans cette partie deux systèmes différents. D'une part un gaz de bosons identiques et d'autre part un ensemble de fermions à deux états internes notés \uparrow et \downarrow dont les masses sont différentes. Chacun de ces deux gaz est confiné indépendamment dans un guide d'onde uni- ou bidimensionnel.

De plus, afin d'étudier de façon précise ces différents gaz au voisinage d'une résonance de Feshbach, nous modélisons les interactions entre particules avec le modèle à deux voies. Ceci permettra en particulier d'inclure le rôle des molécules de Feshbach.

Organisation du chapitre. Dans la première partie de ce chapitre, nous introduisons des notations générales pour ces différents gaz d'atomes couplés à un état

1. En anglais *local density approximation* (LDA)
 2. Ce modèle à deux voies est différent de celui utilisé dans ce manuscrit car il ne prend pas en compte l'interaction directe ni la portée ϵ .

moléculaire. En effet, à notre connaissance, le développement du viriel n'a jamais été étudié pour un modèle incluant une voie fermée.

Nous calculons ensuite de façon élémentaire les coefficients du viriel pour un gaz sans interaction. Nous verrons qu'il est difficile d'appliquer la même méthode que Beth et Uhlenbeck (cf annexe 5.A) pour calculer le second coefficient du viriel dans un guide d'onde, mais que l'approche diagrammatique [37] adaptée au modèle à deux voies permet de trouver une formule analogue à celle de Beth et Uhlenbeck.

5.2 Modèle à deux voies dans un guide d'onde

Le modèle à deux voies utilisé dans cette partie est le même que celui décrit dans le chapitre 2. Il est présenté ici en seconde quantification et les notations sont adaptées afin de prendre en compte les différences entre un système bosonique et un système fermionique, ainsi que la présence d'un guide d'onde.

5.2.1 Hamiltonien

Espèces considérées. Afin d'homogénéiser les notations, nous utilisons dans cette partie l'indice η qui caractérise un type d'atome : $\eta = \text{b}, \uparrow, \downarrow$ ou m selon que la particule considérée est un boson, un fermion d'état interne \uparrow ou \downarrow , ou une molécule diatomique.

Nombres quantiques et conventions. Une particule libre est caractérisée par un ensemble de trois nombres quantiques notés α . Lorsque le gaz est libre selon les trois directions, ces nombres sont :

$$\alpha = (k_x, k_y, k_z) \quad ; \quad \alpha \in \mathbb{R}^3. \quad (5.2.1)$$

Lorsqu'il est confiné par un piège harmonique isotrope dans le plan $x-y$ (guide d'onde unidimensionnel) ou dans la direction z (guide d'onde bidimensionnel), cet ensemble de nombres quantique est :

$$\alpha = (k_x, k_y, n_z) \quad ; \quad \alpha \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{N} \quad \text{guide d'onde 2D}, \quad (5.2.2)$$

$$\alpha = (n_x, n_y, k_z) \quad ; \quad \alpha \in \mathbb{N}^2 \times \mathbb{R} \quad \text{guide d'onde 1D}. \quad (5.2.3)$$

L'énergie cinétique d'une particule η de masse m_η est alors :

$$\epsilon_\eta^\alpha = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\eta} + \hbar\omega_\perp \left[0 \text{ ou } \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \text{ ou } (n_x + n_y + 1) \right]. \quad (5.2.4)$$

Afin de quantifier les nombres d'onde dans les directions où les particules ne ressentent pas de piégeage harmonique, on considère des conditions aux limites périodiques pour une boîte de longueur L :

$$k_n = \frac{2\pi}{L} n \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (5.2.5)$$

On choisit la convention pour les ondes planes suivante, par exemple dans la direction x :

$$\frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L}}. \quad (5.2.6)$$

Cependant, toute cette étude n'étant valable que dans la limite thermodynamique, les sommes sur les nombres d'onde \sum_k sont à comprendre au sens $L \int \frac{dk}{2\pi}$ et le passage à la limite $L \rightarrow \infty$ sera effectué implicitement dès que cela est possible. Les opérateurs $a_{\eta,\alpha}^\dagger$ créent une particule de type η avec un ensemble de nombre quantiques α . Les relations de commutations vérifiées par ces opérateurs sont alors :

$$\left\{ \hat{a}_{\eta,\alpha}, \hat{a}_{\eta',\alpha'}^\dagger \right\} = \delta_{\eta,\eta'} \delta_{\alpha,\alpha'} \quad \text{pour} \quad (\eta = \uparrow \text{ ou } \downarrow) \text{ et } (\eta' = \uparrow \text{ ou } \downarrow), \quad (5.2.7)$$

$$\left[\hat{a}_{\eta,\alpha}, \hat{a}_{\eta,\alpha'}^\dagger \right] = \delta_{\alpha,\alpha'} \quad \text{pour} \quad \eta = \text{b ou m}. \quad (5.2.8)$$

Les autres commutateurs (resp. anticommutateurs) mettant en jeu des opérateurs bosoniques (resp. fermioniques) sont nuls.

Hamiltonien. Le système est défini par un Hamiltonien indépendant du temps qui, selon que l'espèce atomique soit bosonique (cas noté B) ou un mélange de deux espèces fermioniques (cas noté F), s'écrit :

$$\hat{H}_B = \sum_{\eta=\text{b,m}} \left(\hat{H}_\eta^0 \right) + \hat{V}_B + \hat{W}_B + E_m \hat{N}_m \quad ; \quad \hat{H}_F = \sum_{\eta=\uparrow,\downarrow,\text{m}} \left(\hat{H}_\eta^0 \right) + \hat{V}_F + \hat{W}_F + E_m \hat{N}_m \quad (5.2.9)$$

Le Hamiltonien sans interaction d'une particule η s'écrit en seconde quantification comme :

$$\hat{H}_\eta^0 = \sum_{\alpha} \epsilon_{\eta}^{\alpha} \hat{a}_{\eta,\alpha}^\dagger \hat{a}_{\eta,\alpha}. \quad (5.2.10)$$

En particulier une molécule étant constituée de deux bosons identiques ou deux fermions identiques, on a :

$$m_m = 2m_b \quad \text{ou} \quad m_m = m_{\uparrow} + m_{\downarrow}. \quad (5.2.11)$$

\hat{N}_η est l'observable nombre de particules η dans le Hamiltonien (5.2.9) :

$$\hat{N}_\eta = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\eta,\alpha}^\dagger \hat{a}_{\eta,\alpha}, \quad (5.2.12)$$

et l'énergie interne moléculaire³ est notée E_m . L'interaction directe entre deux bosons ou deux fermions différents s'écrit dans ce formalisme :

$$\hat{V}_B = \frac{g}{2} \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_4, \alpha_3 | \hat{A}_\epsilon^\dagger \hat{A}_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \hat{a}_{\text{b},\alpha_4}^\dagger \hat{a}_{\text{b},\alpha_3}^\dagger \hat{a}_{\text{b},\alpha_2} \hat{a}_{\text{b},\alpha_1}, \quad (5.2.13)$$

$$\hat{V}_F = g \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_4, \alpha_3 | \hat{A}_\epsilon^\dagger \hat{A}_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \hat{a}_{\uparrow,\alpha_4}^\dagger \hat{a}_{\downarrow,\alpha_3}^\dagger \hat{a}_{\downarrow,\alpha_2} \hat{a}_{\uparrow,\alpha_1}. \quad (5.2.14)$$

L'opérateur \hat{A}_ϵ n'agit de façon non triviale que sur les variables relatives d'une paire d'atome :

$$\hat{A}_\epsilon = \mathbb{1}_{\text{cdm}} \otimes \langle \delta_\epsilon |, \quad (5.2.15)$$

où $\mathbb{1}_{\text{cdm}}$ est l'identité dans l'espace de Hilbert correspondant aux variables du centre de masse d'une paire atomique et où le ket $|\delta_\epsilon\rangle$ est défini par (2.3.9). Le couplage de

3. Dans les chapitres précédent, cette grandeur est notée E_{mol} (chapitre 3) ou E_η^{m} (chapitre 4).

Feshbach peut également s'écrire avec l'opérateur \hat{A}_ϵ et prend la forme suivante pour un gaz bosonique ou fermionique :

$$\hat{W}_B = \frac{\Lambda}{\sqrt{2}} \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_3 | \hat{A}_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \hat{a}_{m, \alpha_3}^\dagger \hat{a}_{b, \alpha_1} \hat{a}_{b, \alpha_2} + \text{h.c.} \quad (5.2.16)$$

$$\hat{W}_F = \Lambda \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_3 | \hat{A}_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \hat{a}_{m, \alpha_3}^\dagger \hat{a}_{\downarrow, \alpha_1} \hat{a}_{\uparrow, \alpha_2} + \text{h.c.} \quad (5.2.17)$$

Les facteurs $1/2$ pour l'interaction directe bosonique (5.2.14) et $1/\sqrt{2}$ dans la définition bosonique du couplage de Feshbach (5.2.16) permettent d'obtenir exactement la même matrice de transition (5.7.44) pour les bosons et les fermions.

5.2.2 Nombres de particules conservées

Le couplage de Feshbach entre atomes et molécules implique que le Hamiltonien du modèle à deux voies (5.2.9) ne conserve pas le nombre de particules de chaque espèce. Cependant il conserve le nombre total d'atomes bosoniques (incluant ceux qui constituent les molécules) ainsi que le nombre total d'atomes fermioniques de chaque espèce (incluant également les atomes constituant les molécules) :

$$[\hat{N}_b + 2\hat{N}_m, \hat{H}_B] = 0 \quad ; \quad [\hat{N}_{\uparrow/\downarrow} + \hat{N}_m, \hat{H}_F] = 0. \quad (5.2.18)$$

5.2.3 Équilibre chimique et grand potentiel

Dans le cadre du modèle à deux voies, le couplage entre atomes et molécules peut se traduire par des réactions chimiques élémentaires :

$$1 \text{ boson} + 1 \text{ boson} \rightleftharpoons 1 \text{ molécule} \quad ; \quad 1 \text{ fermion } \uparrow + 1 \text{ fermion } \downarrow \rightleftharpoons 1 \text{ molécule}. \quad (5.2.19)$$

Si les atomes sont des bosons, deux d'entre eux peuvent former une molécule de la voie fermée et inversement. Si les espèces considérées sont des fermions polarisées, seuls deux fermions de nombres quantiques internes différents peuvent former une molécule. Dans l'ensemble grand canonique, le potentiel chimique de la voie fermée μ_m est alors imposé par l'équilibre chimique [46] :

$$\mu_m = 2\mu_b \quad ; \quad \mu_m = \mu_\uparrow + \mu_\downarrow, \quad (5.2.20)$$

où μ_η est le potentiel chimique de l'espèce η . Cette relation est essentielle car elle impose la forme du développement en cumulants (5.3.1) et permet d'inclure la contribution moléculaire dans ce développement. En particulier elle impose un lien entre les fugacités des différentes espèces $z_\eta = e^{\beta\mu_\eta}$:

$$z_m = (z_b)^2 \quad ; \quad z_m = z_\uparrow z_\downarrow. \quad (5.2.21)$$

À cause de cet équilibre chimique, les relations thermodynamiques qui relient les nombres de particules et les grands potentiels Ω_B pour le gaz bosonique et Ω_F pour le gaz fermionique sont :

$$\langle \hat{N}_b \rangle + 2\langle \hat{N}_m \rangle = -\frac{\partial \Omega_B}{\partial \mu_b} \quad ; \quad \langle \hat{N}_{\uparrow/\downarrow} \rangle + \langle \hat{N}_m \rangle = -\frac{\partial \Omega_F}{\partial \mu_{\uparrow/\downarrow}}. \quad (5.2.22)$$

5.3 Développement en cumulants et développement du viriel

5.3.1 Développement en cumulants

Définition. On voit avec le paragraphe précédent qu'il est naturel de manipuler le développement du grand potentiel en puissances des fugacités. Lorsque le système est composé d'une seule espèce ou deux espèces atomiques, ce développement s'écrit [134] :

$$\Omega_B = -\frac{Q}{\beta} \sum_{n \geq 1} b_n (z_b)^n \quad ; \quad \Omega_F = -\frac{Q}{\beta} \sum_{n+p \geq 1} b_{n,p} (z_\uparrow)^n (z_\downarrow)^p. \quad (5.3.1)$$

La longueur d'onde de de Broglie choisie comme référence est celle d'un boson b ou d'un fermion \uparrow :

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \quad ; \quad m = m_b \text{ ou } m_\uparrow. \quad (5.3.2)$$

La fonction de partition à un corps dans un guide d'onde de dimension D pour un boson b ou un fermion \uparrow est ainsi :

$$Q = \frac{(L/\lambda)^D}{[2 \sinh(\beta\hbar\omega_\perp/2)]^{3-D}}. \quad (5.3.3)$$

Les coefficients b_n et $b_{n,p}$ sont appelés cumulants et sont reliés aux coefficients du viriel. Grâce à l'équilibre chimique (5.2.21), la contribution moléculaire est bien incluse dans ce développement.

Lien avec les fonctions de partition. Pour un gaz bosonique, on définit un complexe d'ordre n comme étant l'ensemble des états propres du Hamiltonien \hat{H}_B composé de N_b bosons et de N_m molécules tel que $N_b + 2N_m = n$. On appelle Q_n la fonction de partition de ce complexe. De la même façon, pour le gaz fermionique, on appelle complexe d'ordre (n, m) l'ensemble des états propres du Hamiltonien \hat{H}_F composé de N_\uparrow fermions \uparrow , N_\downarrow fermions \downarrow et N_m molécules tel que $N_\uparrow + N_m = n$ et $N_\downarrow + N_m = p$. La fonction de partition de ce complexe est notée $Q_{n,p}$. Le grand potentiel peut alors s'écrire grâce à ces fonctions de partition :

$$\Omega_B = -k_B T \ln \left[1 + \sum_{n \geq 1} Q_n (z_b)^n \right] \quad ; \quad \Omega_F = -k_B T \ln \left[1 + \sum_{n+p \geq 1} Q_{n,p} (z_\uparrow)^n (z_\downarrow)^p \right]. \quad (5.3.4)$$

Le développement du viriel étant valable pour des petites fugacités, on peut développer les grands potentiels pour le système bosonique en :

$$\Omega_B = \frac{-1}{\beta} \left\{ Q_1 z_b + \left[Q_2 - \frac{(Q_1)^2}{2} \right] (z_b)^2 + \dots \right\}, \quad (5.3.5)$$

et pour le système fermionique en :

$$\Omega_F = \frac{-1}{\beta} \left\{ Q_{1,0} z_\uparrow + Q_{0,1} z_\downarrow + (Q_{1,1} - Q_{1,0} Q_{0,1}) z_\uparrow z_\downarrow \right. \\ \left. + \left[Q_{2,0} - \frac{(Q_{1,0})^2}{2} \right] z_\uparrow^2 + \left[Q_{0,2} - \frac{(Q_{0,1})^2}{2} \right] z_\downarrow^2 + \dots \right\}, \quad (5.3.6)$$

où d'après l'équation (5.3.3) on a $Q_{1,0} = Q$ ou $Q_1 = Q$. Pour un système fermionique, la fonction de partition du complexe (0,1) se calcule et on obtient $Q_{0,1} = (m_\downarrow/m_\uparrow)^{D/2} Q$. On peut alors relier les cumulants avec les fonctions de partition des complexes d'ordre n pour les bosons, par exemple aux deux premiers ordres :

$$b_1 = 1 \quad ; \quad b_2 = \frac{Q_2}{Q} - \frac{Q}{2} \quad (5.3.7)$$

et avec les complexes d'ordre (n,p) pour les fermions, ce qui donne pour les premiers termes :

$$b_{1,0} = 1 \quad ; \quad b_{0,1} = \frac{Q_{0,1}}{Q} \quad ; \quad b_{1,1} = \frac{Q_{1,1}}{Q} - Q_{0,1} \quad ; \\ b_{2,0} = \frac{Q_{2,0} - \frac{Q^2}{2}}{Q} \quad ; \quad b_{0,2} = \frac{Q_{0,2} - \frac{(Q_{0,1})^2}{2}}{Q}. \quad (5.3.8)$$

Bien que nous n'utiliserons les équations (5.3.7) et (5.3.8) que dans la remarque du paragraphe 5.4, elle sont particulièrement intéressantes pour deux raisons. Tout d'abord, elle mettent en lumière le lien entre physique du petit nombre de corps *via* les fonctions de partition des complexes et la thermodynamique *via* les cumulants. Ceci est une propriété générale : pour étudier le n -ième coefficient du viriel, il faut s'intéresser au problème à n corps. Ensuite, ce lien est l'une des méthodes habituelles du calcul des coefficients du viriel qui consiste à les déduire directement des fonctions de partition à n corps (par exemple voir les références [128, 129, 33, 135, 136, 134, 32, 35]).

Théorème de Hellmann-Feynman. Dans le Hamiltonien du modèle à deux voies (5.2.9), seul le terme de la voie fermée $E_m \hat{N}_m$ dépend de l'énergie moléculaire. En utilisant le théorème de Hellmann-Feynman [68], on trouve une relation qui relie le grand potentiel et le nombre moyen de molécules dans la voie fermée :

$$\langle \hat{N}_m \rangle = \frac{\partial \Omega_{B/F}}{\partial E_m}. \quad (5.3.9)$$

En utilisant la relation (5.3.9) ainsi que le développement (5.3.1) qui définit les cumulants, on peut développer le nombre de molécules en puissances des fugacités pour un gaz atomique bosonique à gauche et fermionique à droite :

$$\langle \hat{N}_m \rangle = \frac{-Q}{\beta} \sum_{n \geq 1} \frac{\partial b_n}{\partial E_m} (z_b)^n \quad ; \quad \langle \hat{N}_m \rangle = \frac{-Q}{\beta} \sum_{n+p \geq 1} \frac{\partial b_{n,p}}{\partial E_m} (z_\uparrow)^n (z_\downarrow)^p. \quad (5.3.10)$$

5.3.2 Développement du viriel

Définition. À cause des réactions chimiques entre atomes et molécules, le nombre d'atomes ne se conserve pas. Grâce à l'équation (5.2.18), nous définissons donc le développement du viriel d'un gaz confiné dans un guide d'onde de dimension D par :

$$\Omega_B = -\frac{Q}{\beta} \sum_{n \geq 1} (\lambda)^{nD} a_n \left(\rho_D^b + 2\rho_D^m \right)^n, \quad (5.3.11)$$

$$\Omega_F = -\frac{Q}{\beta} \sum_{n+p \geq 1} (\lambda)^{(n+p)D} a_{n,p} \left(\rho_D^\uparrow + \rho_D^m \right)^n \left(\rho_D^\downarrow + \rho_D^m \right)^p. \quad (5.3.12)$$

Dans les équations (5.3.11) et (5.3.12), a_n (resp. $a_{n,p}$) sont les coefficients du viriel du gaz bosonique (resp. fermionique). La densité⁴ en dimension D de l'espèce η est notée ρ_D^η :

$$\rho_D^\eta = \frac{\langle \hat{N}_\eta \rangle}{L^D}. \quad (5.3.13)$$

Lien entre cumulants et coefficients du viriel. En utilisant la relation (5.2.22) ainsi que le développement (5.3.1), on peut développer le nombre de particules en puissances des fugacités pour un gaz bosonique :

$$\langle \hat{N}_b \rangle + 2\langle \hat{N}_m \rangle = Q \sum_{n \geq 1} n b_n z_b^n, \quad (5.3.14)$$

et pour un gaz fermionique :

$$\langle \hat{N}_\uparrow \rangle + \langle \hat{N}_m \rangle = Q \sum_{n+p \geq 1} n b_{n,p} (z_\uparrow)^n (z_\downarrow)^p \quad ; \quad \langle \hat{N}_\downarrow \rangle + \langle \hat{N}_m \rangle = Q \sum_{n+p \geq 1} p b_{n,p} (z_\uparrow)^n (z_\downarrow)^p. \quad (5.3.15)$$

En utilisant les équations (5.3.13) (5.3.14) et (5.3.15), on trouve une relation entre les coefficients du viriel (5.3.11) et (5.3.12) et les cumulants (5.3.1) dans le cas où le gaz est bosonique :

$$a_1 = \frac{L^D}{\lambda^D Q} \quad ; \quad a_2 = -b_2 \left(\frac{L^D}{\lambda^D Q} \right)^2, \quad (5.3.16)$$

et dans le cas où le gaz atomique est fermionique :

$$a_{1,0} = \frac{L^D}{\lambda^D Q} \quad ; \quad a_{0,1} = \frac{L^D}{\lambda^D Q} \quad ; \quad a_{1,1} = \frac{-b_{1,1}}{b_{0,1}} \left(\frac{L^D}{\lambda^D Q} \right)^2, \quad (5.3.17)$$

$$a_{2,0} = -b_{2,0} \left(\frac{L^D}{\lambda^D Q} \right)^2 \quad ; \quad a_{0,2} = \frac{-b_{0,2}}{(b_{0,1})^2} \left(\frac{L^D}{\lambda^D Q} \right)^2 \quad (5.3.18)$$

Dans l'espace tridimensionnel $D = 3$, on trouve que $a_1 = a_{0,1} = 1$. Ces relations illustrent le fait que la connaissance des cumulants d'ordre inférieur ou égal à n_0 est équivalente à la connaissance des n_0 premiers coefficients du viriel.

4. Qui est donc soit une densité volumique, soit une densité surfacique, soit une densité linéique.

5.4 Gaz sans interaction dans un guide d'onde

Lorsque le gaz est sans interaction, le nombre de particules suit la statistique n_η de Bose-Einstein pour des bosons et de Fermi-Dirac pour des fermions qui peuvent se développer pour des faibles fugacités :

$$n_\eta(\epsilon - \mu) = \frac{ze^{-\beta\epsilon}}{1 \mp ze^{-\beta\epsilon}} = \sum_{n \geq 1} (\pm 1)^{n+1} (ze^{-\beta\epsilon})^n, \quad (5.4.1)$$

et alors :

$$\langle \hat{N}_\eta \rangle = \sum_\alpha n_\eta(\epsilon_\eta^\alpha - \mu_\eta) \quad \text{si } \eta = \text{b}, \uparrow, \downarrow \quad ; \quad \langle \hat{N}_m \rangle = \sum_\alpha n_m(\epsilon_m^\alpha + E_m - \mu_m). \quad (5.4.2)$$

Dans l'équation (5.4.1), lorsqu'il y a des symboles \pm ou \mp , le signe du haut correspond à la distribution de Bose-Einstein et le signe du bas à celle de Fermi-Dirac. En utilisant les équations (5.4.1) et (5.4.2), on peut développer les nombres de particules en puissances des fugacités, et en comparant ce résultat avec les équations (5.3.14) et (5.3.15) on peut calculer les cumulants pour le gaz sans interaction. Dans le cas fermionique, on obtient :

$$b_{n,0} = \frac{(-1)^{n+1}}{Q} f_D^\uparrow(n) \quad ; \quad b_{0,n} = \frac{(-1)^{n+1}}{Q} f_D^\downarrow(n) \quad ; \quad b_{n,n} = \frac{f_D^m(n) e^{-n\beta E_m}}{Q}. \quad (5.4.3)$$

Dans le cas bosonique, les cumulants dépendent de la parité de l'ordre :

$$b_{2p} = \frac{f_D^b(2p) + f_D^m(p) e^{-p\beta E_m}}{Q} \quad ; \quad b_{2p+1} = \frac{f_D^b(2p+1)}{Q}. \quad (5.4.4)$$

Pour des simplifications d'écriture, nous avons défini la fonction f qui dépend de la particule considérée, de la dimension du guide d'onde D et de l'indice entier n :

$$f_D^\eta(n) = \left(\frac{L}{\lambda_\eta} \right)^D \left(\frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega_\perp n}{2}\right)} \right)^{3-D} \frac{1}{n^{1+D/2}}, \quad (5.4.5)$$

où la longueur d'onde de de Broglie d'une particule de masse m_η est notée :

$$\lambda_\eta = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m_\eta k_B T}}. \quad (5.4.6)$$

Remarque. On peut trouver les mêmes résultats en calculant directement les fonctions de partition, ce que nous allons illustrer ici dans le cas le plus simple pour le second coefficient du gaz bosonique sans interactions où l'on néglige la contribution moléculaire, et sans guide d'onde [voir l'Eq. (5.3.7)]. La fonction de partition d'ordre deux est alors :

$$Q_2 = \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} e^{-\frac{\beta\hbar^2(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2)}{2m_b}} \right) + \sum_{\mathbf{k}} e^{-\frac{2\beta\hbar^2 \mathbf{k}^2}{m_b}}. \quad (5.4.7)$$

ce qui se réécrit en :

$$Q_2 = \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{k}} e^{-\frac{\beta \hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_b}} \right) \left(\sum_{\mathbf{k}'} e^{-\frac{\beta \hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m_b}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-\frac{\beta \hbar^2 \mathbf{k}^2}{m_b}}. \quad (5.4.8)$$

À partir de l'équation (5.3.7), on trouve que le second coefficient du viriel est :

$$b_2 = \frac{1}{2^{5/2}}, \quad (5.4.9)$$

en accord avec l'équation (5.4.4) et avec la référence [137]. La somme de droite de l'équation (5.4.8) est un terme de statistique quantique. Il n'existe donc pas si l'on considère des particules classiques et l'on retrouve alors l'expression habituelle de l'équation d'état d'un gaz parfait classique. Si les particules étaient des fermions identiques, ce terme de statistique serait l'opposé de celui pour des bosons, et le second cumulant serait alors $-2^{-5/2}$.

5.5 Gaz en interaction : la formule de Beth et Uhlenbeck

Dans le cas d'un système strictement tri-, bi- ou unidimensionnel dans un modèle à une voie, la formule de Beth et Uhlenbeck permet de relier le second cumulant aux propriétés collisionnelles à deux corps.

Cumulants en dimension 1 et 2. Les cumulants en dimension D strictement 1 et 2 (et donc sans guide d'onde) sont définis similairement à l'équation (5.3.1) :

$$\Omega_{\text{B}}^D = - \left(\frac{L}{\lambda_b} \right)^D \frac{1}{\beta} \sum_{n \geq 1} b_n^D (z_b)^n \quad ; \quad \Omega_{\text{F}}^D = - \left(\frac{L}{\lambda_{\uparrow}} \right)^D \frac{1}{\beta} \sum_{n+p \geq 1} b_{n,p}^D (z_{\uparrow})^n (z_{\downarrow})^p, \quad (5.5.1)$$

où les grand potentiels en dimension D pour un gaz de bosons ou de fermions sont notés $\Omega_{\text{B/F}}^D$.

Le second cumulant. Le second cumulant d'un gaz en interactions pour un système strictement tri-, bi- ou unidimensionnel est donné par la formule de Beth et Uhlenbeck [27, 137] (voir l'annexe 5.A) pour des bosons :

$$\Delta b_2^D = \left(\frac{m_m}{m_b} \right)^{D/2} \left[\sum_{\text{états liés b}} e^{-\beta \epsilon_b} + \int_0^{\infty} \frac{dk}{\pi} e^{-\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2\mu}} \frac{d\delta(k)}{dk} \right]. \quad (5.5.2)$$

et des fermions :

$$\Delta b_{1,1}^D = \left(\frac{m_m}{m_{\uparrow}} \right)^{D/2} \left[\sum_{\text{états liés b}} e^{-\beta \epsilon_b} + \int_0^{\infty} \frac{dk}{\pi} e^{-\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2\mu}} \frac{d\delta(k)}{dk} \right]. \quad (5.5.3)$$

Dans les équations (5.5.2) et (5.5.3), Δb_2^D (resp. $\Delta b_{1,1}^D$) est la différence entre le second cumulant [resp. cumulant d'ordre (1,1)] pour un gaz bosonique (resp. fermionique) avec et sans interactions en dimension D et les déphasages δ qui dépendent de la dimension D sont définis par l'équation (3.1.7). Lorsque le système à deux corps possède des états liés, leurs énergies (négatives) sont notées ϵ_b .

5.6 Peut-on utiliser la démonstration de Beth-Uhlenbeck dans un guide d'onde ?

Nous venons de voir que la formule de Beth et Uhlenbeck est valable pour une dimension fixée. Dans la partie 3.5, nous avons défini les déphasages dans un guide d'onde pour le modèle à deux voies. Nous nous sommes donc demandé quelle forme prend la relation de Beth-Uhlenbeck dans des guides d'onde lorsque les niveaux transverses peuvent être occupés. Nous avons donc dans un premier temps essayé d'adapter la démonstration historique.

Densité d'états. L'un des points clefs de la démonstration de Beth et Uhlenbeck consiste à calculer la densité d'états en considérant que le système est enfermé dans une boîte sphérique (cf annexe 5.A). Après une collision dans un guide d'onde de dimension $D = 1$ ou 2 , tous les niveaux du guide d'onde énergétiquement accessibles et qui respectent la symétrie de la collision sont peuplés et les vecteurs d'onde associés sont reliés par la conservation de l'énergie :

$$E = \frac{\hbar^2 q_p^2}{2\mu} + \hbar\omega_{\perp} \left(2p + \frac{1}{D} \right). \quad (5.6.1)$$

Si on considère que la fonction d'onde s'annule au contact d'une boîte sphérique de rayon R , alors :

$$\forall p \in \llbracket 0 ; \lfloor \tau \rfloor \rrbracket, \quad \sin \left(q_p R + \frac{\pi}{2D} \right) = 0. \quad (5.6.2)$$

Ceci implique que quel que soit p , il existe un entier m_p tel que :

$$q_p R + \frac{\pi}{2D} = m_p \pi. \quad (5.6.3)$$

En combinant les équations (5.6.1) et (5.6.3), on trouve :

$$\left(m_p - \frac{1}{2D} \right)^2 - \left(m_{p+1} - \frac{1}{2D} \right)^2 = \frac{2R^2}{\pi^2 a_{\perp}^2}, \quad (5.6.4)$$

qui est une relation qui ne peut pas être vérifiée pour tous les entiers m_p et quelle que soit R . Il n'est donc pas possible de considérer une boîte arbitraire où les fonctions d'ondes s'annulent au bord ; la méthode de Beth et Uhlenbeck ne peut pas s'appliquer directement.

Méthode diagrammatique. Nous avons donc décidé d'adapter la méthode diagrammatique, introduite par X. Leyronas dans l'article [37], au modèle à deux voies pour trouver une formule du type de celle de Beth et Uhlenbeck valable dans un guide d'onde.

5.7 Approche diagrammatique

Cette partie a pour but de résumer l'approche diagrammatique en température non nulle. Dans un premier temps nous adaptions le développement diagrammatique [138] au modèle à deux voies dans un guide d'onde. Dans un deuxième temps, nous utilisons cette méthode pour calculer le second cumulant.

Systèmes considérés. Nous considérons toujours d'une part un gaz de bosons identiques et d'autre part un système de fermions d'états internes \uparrow et \downarrow , interagissant uniquement dans l'onde s . De plus, le gaz sera également composé de molécules bosoniques diatomiques dans la voie fermée composées de deux bosons dans un cas et de deux fermions d'états internes différents dans l'autre cas. Ce système sera considéré soit dans l'espace libre tridimensionnel, soit dans un guide d'onde uni- ou bidimensionnel, le formalisme adopté permettant de traiter ensemble ces six cas.

Notations. Les nombres quantiques du système sans interaction sont toujours notés α et sont définis par les équations (5.2.1)(5.2.2) et (5.2.3). Ces nombres seront choisis aussi bien pour caractériser une particule bosonique ou fermionique, une molécule, une particule relative ou une particule du centre de masse. Lorsque des confusions sont possible, des indices seront rajoutés : par exemple, les nombres quantiques associés à une particule relative seront notés α_{rel} et celles associées à des coordonnées de centre de masse α_{cdm} .

Chapeau sur les opérateurs. Dans cette partie seulement, et pour suivre les notations de [138], les opérateurs seront notés sans chapeau. La notation avec chapeau sera réservée pour désigner les opérateurs en représentation interaction.

Buts. Cette partie sera décomposée en trois étapes :

- ★ Construire les règles de Feynman associées aux diagrammes du modèle à deux voies dans un guide d'onde.
- ★ Adapter la méthode diagrammatique du calcul des cumulants au modèle à deux voies.
- ★ Démontrer la formule de Beth et Uhlenbeck dans un guide d'onde avec l'interaction du modèle à deux voies.

5.7.1 Fonction de Green en temps imaginaire

Hamiltonien et interactions. Les Hamiltoniens considérés ici, H_F et H_B (5.2.9) peuvent se décomposer en une partie sans interaction :

$$\sum_{\eta=\text{b,m}} \left(H_{\eta}^0 \right) + E_m N_m \quad (\text{bosons}) \quad ; \quad \sum_{\eta=\uparrow,\downarrow,\text{m}} \left(H_{\eta}^0 \right) + E_m N_m \quad (\text{fermions}), \quad (5.7.1)$$

et des interactions notées V qui valent selon les cas qui seront considérés plus tard :

$$V = \left(V_{B/F} \right) \text{ ou } \left(W_{B/F} \right) \text{ ou } \left(V_{B/F} + W_{B/F} \right). \quad (5.7.2)$$

Fonction de Green. Ce système thermodynamique étant considéré dans l'ensemble grand canonique, nous posons, selon si le gaz atomique est bosonique ou fermionique :

$$K = H_{B/F} - \sum_{\substack{\eta=\text{b,m}/ \\ \eta=\uparrow,\downarrow,\text{m}}} \mu_{\eta} N_{\eta} \quad ; \quad K_0 = \sum_{\substack{\eta=\text{b,m}/ \\ \eta=\uparrow,\downarrow,\text{m}}} \left(H_{\eta}^0 \right) + E_m N_m - \sum_{\substack{\eta=\text{b,m}/ \\ \eta=\uparrow,\downarrow,\text{m}}} \mu_{\eta} N_{\eta}. \quad (5.7.3)$$

La fonction de Green à une particule d'état interne η en temps imaginaire est définie comme :

$$G_\eta(\alpha, \tau) = \frac{-\text{Tr} \left[e^{-\beta K} \mathbb{T}_\tau a_{\eta, \alpha}(\tau) a_{\eta, \alpha}^\dagger(0) \right]}{\text{Tr} (e^{-\beta K})}, \quad (5.7.4)$$

où l'évolution des opérateurs en représentation de Heisenberg en temps imaginaires est :

$$a_{\eta, \alpha}(\tau) = e^{K\tau/\hbar} a_{\eta, \alpha} e^{-K\tau/\hbar} \quad (5.7.5)$$

$$a_{\eta, \alpha}^\dagger(\tau) = e^{K\tau/\hbar} a_{\eta, \alpha}^\dagger e^{-K\tau/\hbar}. \quad (5.7.6)$$

Il est important de noter qu'avec cette définition, tant que les temps $t = i\tau$ sont imaginaires ($\tau \in \mathbb{R}$) :

$$a_{\eta, \alpha}^\dagger(\tau) \neq [a_{\eta, \alpha}(\tau)]^\dagger. \quad (5.7.7)$$

Dans l'équation (5.7.4), le produit ordonné en temps \mathbb{T}_τ ordonne les opérateurs par temps τ décroissant (le plus petit à droite) en incluant un préfacteur $(-1)^P$ où P est le nombre de permutations d'opérateurs fermioniques dont on a besoin pour restaurer l'ordre d'origine. Par exemple, si $\tau_1 < \tau_2$:

$$\mathbb{T}_\tau a_{\uparrow, \alpha}(\tau_1) a_{\uparrow, \alpha}^\dagger(\tau_2) = -\mathbb{T}_\tau a_{\uparrow, \alpha}^\dagger(\tau_2) a_{\uparrow, \alpha}(\tau_1) = -a_{\uparrow, \alpha}^\dagger(\tau_2) a_{\uparrow, \alpha}(\tau_1). \quad (5.7.8)$$

Lien avec le nombre de particules. La connaissance de ces fonctions de Green permet de calculer les grandeurs thermodynamiques. En particulier le nombre moyen dans l'ensemble grand canonique de particule η noté N_η est relié aux fonctions de Green par⁵ :

$$N_\eta = \mp \sum_\alpha G_\eta(\alpha, 0^-), \quad (5.7.9)$$

où dans le symbole \mp , le signe du haut correspond à une particule bosonique et celui du bas à une particule fermionique. Le calcul des cumulants revient donc à développer ces nombres de particules (et donc les fonctions de Green associées) en puissances des fugacités [voir les équations (5.3.14) et (5.3.15)].

5.7.2 Représentation interaction

Pour chaque opérateur O on définit sa représentation interaction que l'on note avec un chapeau \hat{O} par :

$$\hat{O}(\tau) = e^{K_0\tau/\hbar} O e^{-K_0\tau/\hbar}. \quad (5.7.10)$$

Les représentations d'Heisenberg et interaction sont ainsi reliées par un opérateur non unitaire noté U :

$$O(\tau) = U^{-1}(\tau) \hat{O}(\tau) U(\tau) \quad \text{avec} \quad U(\tau) = e^{\tau K_0/\hbar} e^{-\tau K/\hbar}. \quad (5.7.11)$$

Dans cette représentation, les fonctions d'onde ainsi que les observables dépendent du temps. Cependant, cette représentation possède un grand avantage : l'interaction n'intervient plus que dans l'opérateur d'évolution U . On peut alors adopter une approche

5. À partir de maintenant et jusqu'à la fin de ce manuscrit, les nombres moyens de particules seront notés sans crochets.

perturbative en développant ce dernier en puissances de l'interaction V . En utilisant la démonstration classique (voir par exemple [138]), on montre que :

$$U(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_0^\tau d\tau_n \int_0^\tau d\tau_{n-1} \dots \int_0^\tau d\tau_1 \mathbb{T}_\tau \left[\hat{V}(\tau_n) \hat{V}(\tau_{n-1}) \dots \hat{V}(\tau_1) \right]. \quad (5.7.12)$$

Ceci permet de développer les fonctions de Green en puissances de l'interaction :

$$G_\eta(\alpha, \tau) = \frac{-\sum_{n \geq 0} \left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \left\langle \mathbb{T}_\tau \int_{[0, \beta\hbar]^n} \left[\prod_{i=0}^n d\tau_i \hat{V}(\tau_i) \right] \hat{a}_{\eta, \alpha}(\tau) \hat{a}_{\eta, \alpha}^\dagger(0) \right\rangle_0}{\sum_{n \geq 0} \left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \left\langle \mathbb{T}_\tau \int_{[0, \beta\hbar]^n} \prod_{i=0}^n d\tau_i \hat{V}(\tau_i) \right\rangle_0}. \quad (5.7.13)$$

Dans l'Eq. (5.7.13), la moyenne d'ensemble est prise par rapport au système sans interaction :

$$\langle \dots \rangle_0 = \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta K_0} \dots \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta K_0} \right]}, \quad (5.7.14)$$

Notations. Grâce à l'utilisation du théorème de Wick (cf annexe 5.B), on peut développer la fonction de Green en puissances de l'interaction \hat{V} . On note alors

$$G_\eta(\alpha, \tau) = \sum_{n \geq 0} G_\eta^{(n)}(\alpha, \tau) \quad (5.7.15)$$

où chaque fonction $G_\eta^{(n)}(\alpha, \tau)$ est d'ordre n en V .

But. Le calcul de ces développements peut s'automatiser grâce à une écriture diagrammatique. Afin de bien construire les règles de Feynman associées à ces diagrammes, nous allons calculer explicitement les premiers termes.

5.7.3 Fonctions de Green à l'ordre 0

À l'ordre zéro, $U(\hbar\beta) = 1 + \mathcal{O}(\hat{V})$ et on obtient pour le calcul de la fonction de Green⁶ :

$$G_\eta(\alpha, \tau) = - \left\langle \mathbb{T}_\tau \hat{a}_{\eta, \alpha}(\tau) \hat{a}_{\eta, \alpha}^\dagger(0) \right\rangle_0 + \mathcal{O}(\hat{V}). \quad (5.7.16)$$

Ce terme se calcule et on trouve :

$$G_\eta^0(\alpha, \tau) = \mp e^{-(\epsilon_\eta^\alpha - \mu_\eta)\tau/\hbar} \left[\pm \Theta(\tau) + n_\eta(\epsilon_\eta^\alpha - \mu_\eta) \right] \quad \text{pour } \eta = b, \uparrow, \downarrow \quad (5.7.17)$$

$$G_m^0(\alpha, \tau) = -e^{-(\epsilon_m^\alpha + E_m - \mu_m)\tau/\hbar} \left[\Theta(\tau) + n_m(\epsilon_m^\alpha + E_m - \mu_m) \right], \quad (5.7.18)$$

où dans les symboles \pm et \mp , le signe du haut correspond à un boson et celui du bas à un fermion.

6. La notation $\mathcal{O}(V)$ signifie que les autres termes du développement sont d'ordre $n \geq 1$ en V .

5.7.4 Interaction directe du modèle à deux voies

Dans cette partie nous ne considérons que l'interaction directe entre les atomes (bosoniques ou fermioniques) et nous négligerons alors le couplage de Feshbach entre atomes et molécules. Dans le cadre du modèle à deux voies, cette interaction directe en représentation interaction est :

$$\hat{V}_B(\tau) = \frac{g}{2} \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_3, \alpha_4 | A_\epsilon^\dagger A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \hat{a}_{b, \alpha_4}^\dagger(\tau) \hat{a}_{b, \alpha_3}^\dagger(\tau) \hat{a}_{b, \alpha_2}(\tau + 0^-) \hat{a}_{b, \alpha_1}(\tau + 0^-), \quad (5.7.19)$$

$$\hat{V}_F(\tau) = g \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_3, \alpha_4 | A_\epsilon^\dagger A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \hat{a}_{\uparrow, \alpha_4}^\dagger(\tau) \hat{a}_{\downarrow, \alpha_3}^\dagger(\tau) \hat{a}_{\downarrow, \alpha_2}(\tau + 0^-) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_1}(\tau + 0^-). \quad (5.7.20)$$

Cette interaction est représentée par le vertex de la Fig. 5.1.

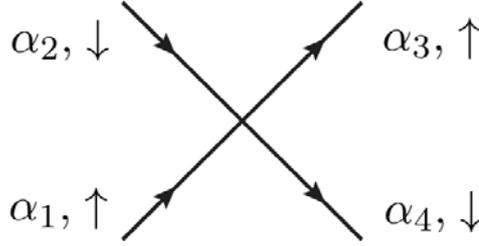


Fig. 5.1 Diagramme de l'interaction directe pour des fermions non polarisés. Dans le cas bosonique, on utilise le même vertex sans préciser les états internes.

Fermions différents. L'injection de l'interaction directe (5.7.20) dans l'équation générale de la fonction de Green à l'ordre 1 (5.7.13) pour la composante \uparrow , ainsi que l'utilisation du théorème de Wick donne 6 termes dus au numérateur dans le calcul de $G_\uparrow^{(1)}(\alpha_0, \tau)$. Les deux termes en $\langle T_\tau \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}(\tau) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}^\dagger(0) \rangle_0$ se simplifient avec la contribution du dénominateur. Sur les 4 termes restants, 3 sont identiquement nuls car couplant des observables ayant des spins différents, par exemple :

$$\langle T_\tau \hat{a}_{\uparrow, \alpha_3}^\dagger(\tau) \hat{a}_{\downarrow, \alpha_2}(\tau) \rangle_0 = 0. \quad (5.7.21)$$

Il ne reste finalement qu'un seul terme⁷ :

$$G_\uparrow^{(1)}(\alpha_0, \tau) = \frac{g}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_3, \alpha_4 | A_\epsilon^\dagger A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \langle T_\tau \hat{a}_{\uparrow, \alpha_4}^\dagger(\tau_1) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}(\tau) \rangle_0 \\ \times \langle T_\tau \hat{a}_{\downarrow, \alpha_3}^\dagger(\tau_1) \hat{a}_{\downarrow, \alpha_2}(\tau_1 + 0^-) \rangle_0 \langle T_\tau \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}^\dagger(0) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_1}(\tau_1) \rangle_0. \quad (5.7.22)$$

7. Dont la signature correspondante est 4, ce qui n'implique pas de changement de signe.

Finalement, la fonction de Green à l'ordre 1 peut s'exprimer à l'aide de fonctions de Green à l'ordre 0 :

$$G_{\uparrow}^{(1)}(\alpha_0, \tau) = \frac{g}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \sum_{\alpha_2} \langle \alpha_2, \alpha_0 | A_{\epsilon}^{\dagger} A_{\epsilon} | \alpha_0, \alpha_2 \rangle G_{\uparrow}^{(0)}(\alpha_0, \tau - \tau_1) G_{\downarrow}^{(0)}(\alpha_2, 0^-) G_{\uparrow}^{(0)}(\alpha_0, \tau_1), \quad (5.7.23)$$

et peut être représentée de façon diagrammatique par la figure. 5.2.

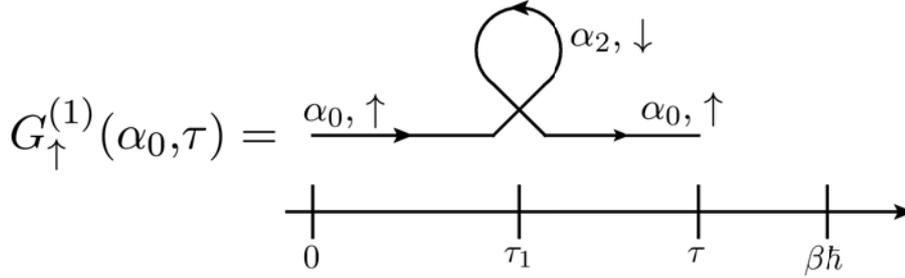


Fig. 5.2 Représentation diagrammatique de $G_{\uparrow}^{(1)}(\alpha_0, \tau)$ dans le cas où la seule interaction est l'interaction directe.

Bosons identiques. Dans le cas des bosons, un calcul similaire donne :

$$G_{\text{b}}^{(1)}(\alpha_0, \tau) = \frac{2g}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \sum_{\alpha_2} \langle \alpha_0, \alpha_2 | A_{\epsilon}^{\dagger} A_{\epsilon} | \alpha_0, \alpha_2 \rangle G_{\text{b}}^{(0)}(\alpha_0, \tau - \tau_1) G_{\text{b}}^{(0)}(\alpha_2, 0^-) G_{\text{b}}^{(0)}(\alpha_0, \tau_1). \quad (5.7.24)$$

Le diagramme associé est le même que celui pour les fermions (cf Fig. 5.2), en enlevant l'indice associé à l'état interne des fermions.

Discussion sur le 0^- dans la fonction de Green sans interaction. Comme on peut le constater dans les équations (5.7.17) et (5.7.18), les fonctions de Green à une particule sans interaction possèdent une discontinuité pour $\tau = 0$:

$$G_{\eta}^{(0)}(\alpha, 0^+) - G_{\eta}^{(0)}(\alpha, 0^-) = -1. \quad (5.7.25)$$

La convention $\tau + 0^-$ dans la définition de l'interaction directe est donc essentielle. Pour des contractions où deux temps différents apparaissent, ce détail n'a pas d'importance. En revanche, pour des contractions où les deux opérateurs agissent à un temps identique, il est impératif de l'utiliser.

Signe de la contribution à l'interaction directe. On peut montrer (voir l'annexe 5.C ou la référence [138]) qu'un diagramme possédant n boucles fermioniques comporte un préfacteur supplémentaire de $(-1)^n$.

5.7.5 Couplage de Feshbach du modèle à deux voies

Dans le Hamiltonien du modèle à deux voies, le mécanisme de Feshbach est modélisé par un couplage cohérent entre la voie ouverte et la voie moléculaire fermée. En représentation interaction, il s'écrit :

$$\hat{W}_B(\tau) = \frac{\Lambda}{\sqrt{2}} \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_3 | A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \hat{a}_{m, \alpha_3}^\dagger(\tau) \hat{a}_{b, \alpha_1}(\tau + 0^-) \hat{a}_{b, \alpha_2}(\tau + 0^-) + \text{h.c.} \quad (5.7.26)$$

$$\hat{W}_F(\tau) = \Lambda \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_3 | A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \hat{a}_{m, \alpha_3}^\dagger(\tau) \hat{a}_{\downarrow, \alpha_1}(\tau + 0^-) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_2}(\tau + 0^-) + \text{h.c.} \quad (5.7.27)$$

Ce couplage est représenté par le diagramme de la Fig. 5.3.

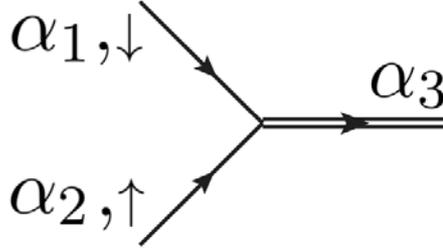


Fig. 5.3 Diagramme du couplage de Feshbach pour le gaz fermionique.

Fermions non polarisés. Dans cette sous-partie, nous considérons que cette interaction est la seule. Tout comme pour l'interaction directe, nous calculons la fonction de Green à une particule à l'ordre (non nul) le plus bas en Λ , puis en déduisons les règles de Feynman de ces deux interactions. L'ordre un en Λ s'annule du fait de la valeur moyenne d'opérateurs \hat{b} ou \hat{b}^\dagger . L'ordre deux est :

$$G_{\uparrow}^{(2)}(\alpha_0, \tau) = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{2!} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \langle T_\tau \hat{W}_F(\tau_2) \hat{W}_F(\tau_1) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}(\tau) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}^\dagger(0) \rangle_0 \\ + \frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{2!} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \langle T_\tau \hat{W}_F(\tau_2) \hat{W}_F(\tau_1) \rangle_0 \langle T_\tau \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}(\tau) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}^\dagger(0) \rangle_0. \quad (5.7.28)$$

Encore une fois, le deuxième terme de droite de l'équation (5.7.28), dû au dénominateur, annule lors de l'utilisation du théorème de Wick les termes contenant :

$$\langle T_\tau \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}(\tau) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}^\dagger(0) \rangle_0. \quad (5.7.29)$$

L'utilisation du théorème de Wick donne alors :

$$\begin{aligned}
G_{\uparrow}^{(2)}(\alpha_0, \tau) = & -\frac{|\Lambda|^2}{2\hbar^2} \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_3, \alpha_4 | A_{\epsilon}^{\dagger} | \alpha_6 \rangle \langle \alpha_5 | A_{\epsilon} | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \\
& \left(\left\langle T_{\tau} \hat{a}_{m, \alpha_6}(\tau_2) \hat{a}_{m, \alpha_5}^{\dagger}(\tau_1) \right\rangle_0 \left\langle T_{\tau} \hat{a}_{\uparrow, \alpha_3}^{\dagger}(\tau_2) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}(\tau) \right\rangle_0 \left\langle T_{\tau} \hat{a}_{\downarrow, \alpha_4}^{\dagger}(\tau_2) \hat{a}_{\downarrow, \alpha_2}(\tau_1) \right\rangle_0 \left\langle T_{\tau} \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}^{\dagger}(0) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_1}(\tau_1) \right\rangle_0 \right. \\
& \left. + \left\langle T_{\tau} \hat{a}_{m, \alpha_5}(\tau_1) \hat{a}_{m, \alpha_6}^{\dagger}(\tau_2) \right\rangle_0 \left\langle T_{\tau} \hat{a}_{\uparrow, \alpha_1}^{\dagger}(\tau_1) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}(\tau) \right\rangle_0 \left\langle T_{\tau} \hat{a}_{\downarrow, \alpha_2}^{\dagger}(\tau_1) \hat{a}_{\downarrow, \alpha_4}(\tau_2) \right\rangle_0 \left\langle T_{\tau} \hat{a}_{\uparrow, \alpha_0}^{\dagger}(0) \hat{a}_{\uparrow, \alpha_3}(\tau_2) \right\rangle_0 \right). \tag{5.7.30}
\end{aligned}$$

Les deux termes de droite de l'équation (5.7.30) sont égaux à un changement d'indices près :

$$\tau_1 \leftrightarrow \tau_2 \quad ; \quad \alpha_1 \leftrightarrow \alpha_3 \quad ; \quad \alpha_2 \leftrightarrow \alpha_4, \tag{5.7.31}$$

ce qui se simplifie avec le préfacteur 1/2. Chacune des quatre fonctions de Green à l'ordre 0 implique un symbole de Kronecker :

$$\delta_{\alpha_6, \alpha_5} \quad ; \quad \delta_{\alpha_3, \alpha_0} \quad ; \quad \delta_{\alpha_4, \alpha_2} \quad ; \quad \delta_{\alpha_0, \alpha_1}. \tag{5.7.32}$$

On trouve alors pour la fonction de Green à l'ordre 2 :

$$\begin{aligned}
G_{\uparrow}^{(2)}(\alpha_0, \tau) = & \left(\frac{\Lambda}{\hbar} \right)^2 \sum_{\alpha_2, \alpha_5} \langle \alpha_0, \alpha_2 | A_{\epsilon}^{\dagger} | \alpha_5 \rangle \langle \alpha_5 | A_{\epsilon} | \alpha_0, \alpha_2 \rangle \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 G_m^{(0)}(\alpha_5, \tau_2 - \tau_1) \\
& \times G_{\uparrow}^{(0)}(\alpha_0, \tau - \tau_2) G_{\downarrow}^{(0)}(\alpha_2, \tau_1 - \tau_2) G_{\uparrow}^{(0)}(\alpha_0, \tau_1), \tag{5.7.33}
\end{aligned}$$

ce qui est exprimé sous forme diagrammatique dans la Fig. 5.4.

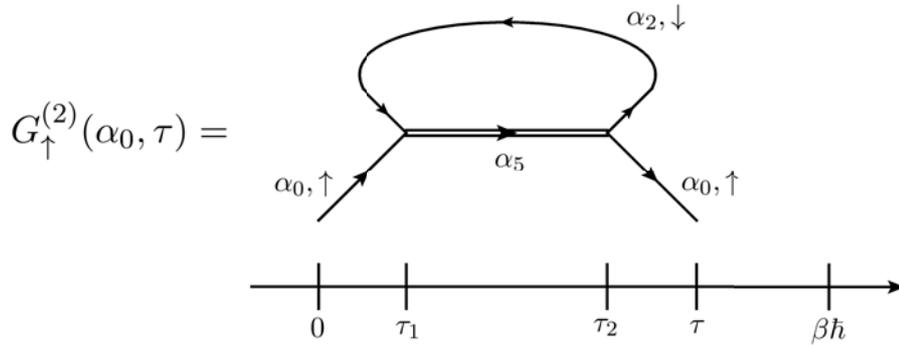


Fig. 5.4 Représentation diagrammatique de $G_{\uparrow}^{(2)}(\alpha_0, \tau)$ dans le cas où la seule interaction est le couplage de Feshbach [voir Eq. (5.7.33)].

Bosons identiques. Si le gaz est bosonique, on obtient un facteur (-2) supplémentaire⁸ par rapport au cas fermionique :

$$G_b^{(2)}(\alpha_0, \tau) = -2 \left(\frac{\Lambda}{\hbar} \right)^2 \sum_{\alpha_2, \alpha_5} \langle \alpha_0, \alpha_2 | A_\epsilon^\dagger | \alpha_5 \rangle \langle \alpha_5 | A_\epsilon | \alpha_0, \alpha_2 \rangle \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 G_m^{(0)}(\alpha_5, \tau_2 - \tau_1) \\ \times G_b^{(0)}(\alpha_0, \tau - \tau_2) G_b^{(0)}(\alpha_2, \tau_1 - \tau_2) G_b^{(0)}(\alpha_0, \tau_1), \quad (5.7.34)$$

Signe de la contribution du couplage de Feshbach. Le couplage de Feshbach comprend des propagateurs moléculaires bosoniques. Dans un diagramme donné, afin de définir les boucles fermioniques, on remplace par la pensée les couplages de Feshbach par des vertex d'interactions directes et on compte de cette façon les boucles fermioniques. De la même façon que pour l'interaction directe, chaque fois qu'un diagramme possède une boucle fermionique, celui-ci prend un signe « moins » supplémentaire (voir l'annexe 5.D).

5.7.6 Règles de Feynman pour le modèle à 2 voies

L'ensemble des règles qui relient les fonctions de Green aux diagrammes de Feynman sont alors :

- ★ Tracer tous les diagrammes topologiquement distincts possédant un nombre pair n_Λ de vertex de couplage (une molécule se désintègre en deux atomes ou deux atomes réagissent pour former une molécule) et $n_g = n - n_\Lambda$ vertex d'interaction directe qui sont plans (pour incorporer le facteur $1/n!$) et connectés (les diagrammes non connectés se compensent avec le dénominateur).
- ★ Assurer la conservation de toutes les quantités conservées par le Hamiltonien (impulsion totale, etc).
- ★ Associer à chaque ligne simple fermionique de τ_1 à τ_2 , d'état interne \uparrow / \downarrow et de nombres quantiques α un facteur $G_{\uparrow/\downarrow}^{(0)}(\alpha, \tau_2 - \tau_1)$.
- ★ Associer à chaque ligne simple bosonique de τ_1 à τ_2 et de nombres quantiques α un facteur $G_b^{(0)}(\alpha, \tau_2 - \tau_1)$.
- ★ Associer à chaque ligne double de τ_1 à τ_2 et de nombres quantiques α un facteur $G_m^{(0)}(\alpha, \tau_2 - \tau_1)$.
- ★ Chaque vertex d'interaction directe donne un facteur $\frac{-g}{\hbar} \langle \alpha_3, \alpha_4 | A_\epsilon^\dagger A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle$ où α_1, α_2 (resp. α_3, α_4) sont les nombres quantiques entrantes (resp. sortantes) du vertex. Le signe « moins » permet d'incorporer le $(-1)^n$ du développement de l'opérateur U .
- ★ Chaque vertex de couplage donne un facteur $\frac{-\Lambda}{\hbar} \langle \alpha_3 | A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle$ (ou son complexe conjugué) où α_1 et α_2 sont les nombres quantiques des deux particules de la voie ouverte et α_3 celui du propagateur moléculaire. Le signe « moins » permet également d'incorporer le $(-1)^n$ du développement de l'opérateur U .
- ★ Dans le cas fermionique, un vertex d'interaction directe conserve les états internes.

8. Le théorème de Wick donne 4 termes au lieu d'un seul qui n'est qu'en partie compensé par la définition du couplage de Feshbach piloté par $\Lambda/\sqrt{2}$ dans le cas bosonique au lieu de Λ dans le cas fermionique. Le changement de signe provient de l'utilisation des produits ordonnés en temps pour retrouver la définition des fonctions de Green.

- ★ Dans le cas fermionique, un vertex de couplage de Feshbach est relié à deux propagateurs atomiques d'états internes différents.
- ★ Multiplier par un facteur global $(-1)^{n_{\wedge}/2}$ à cause de la définition des fonctions de Green bosoniques.
- ★ Chaque boucle fermionique donne un facteur (-1) .
- ★ Intégrrer (ou sommer) sur toutes les variables muettes.
- ★ Une fonction de Green de la forme $G_{\eta}^{(0)}(\alpha, \tau_1 - \tau_1)$ doit être comprise comme $G_{\eta}^{(0)}(\alpha, 0^-)$.

5.7.7 Matrice de transition

Nous définissons dans cette approche diagrammatique la matrice de transition (appelée également matrice T et notée T_2) par la sommation d'échelle de la figure 5.5, où les propagateurs à température nulle sont définis par les équations (5.8.2) et (5.8.3) ainsi que les diagrammes 5.10 et 5.11. Dans ce manuscrit, seul le cas de la température nulle est pertinent. Il est toutefois possible d'étendre la définition de la matrice de transition pour des températures non nulles. L'utilisation de cette matrice permet de synthétiser certaines écritures ayant besoin de cette sommation d'échelle.

Calcul de l'opérateur de transition à température nulle. Le calcul de l'opérateur de transition à température nulle a déjà été effectué dans l'article [39] par un calcul direct dont le résultat est rappelé par l'équation (3.4.3). Dans cette partie, nous calculons à nouveau les éléments de cette matrice en utilisant cette fois-ci un calcul diagrammatique. Ceci permet de vérifier la cohérence de ces deux approches et d'illustrer les calculs diagrammatiques.

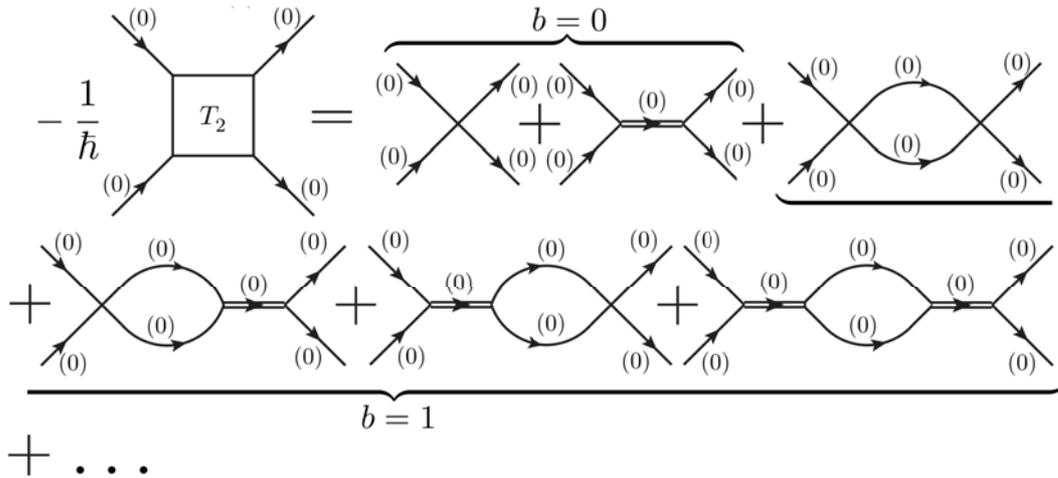


Fig. 5.5 Définition diagrammatique de la matrice de transition à température nulle. Le nombre de bulles particule-particule est noté b et les propagateurs à température nulle sont définis par les équations (5.8.2) et (5.8.3) et les diagrammes 5.10 et 5.11.

Nous allons calculer les éléments de la matrice de transition pour des fermions entre

les états :

$$|\text{in}\rangle = |\alpha_1, \uparrow; \alpha_2, \downarrow\rangle \quad ; \quad \langle \text{out}| = \langle \alpha_3, \uparrow; \alpha_4, \downarrow|. \quad (5.7.35)$$

Si les atomes sont des bosons, les indices \uparrow / \downarrow de l'équation (5.7.35) doivent être enlevés. Les définitions des Hamiltoniens ont été choisies de façon à ce que la matrice de transition ait la même expression pour des fermions ou des bosons.

Afin de calculer les éléments de la matrice de transition, il faut calculer chacun des diagrammes du membre de droite de la Fig. 5.5. Ces diagrammes sont composés de différents éléments : des vertex d'interaction directe notés v , des doubles lignes notées d et des bulles particule-particule notées b . Chaque diagramme possède donc v vertex, d doubles lignes et b bulles et l'ordre dans lequel ces éléments apparaissent ne change pas la valeur du diagramme : il vaut exactement dans l'espace de Laplace

$$- \sum_{\alpha} \langle \text{out}|A_{\epsilon}^{\dagger}|\alpha\rangle \langle \alpha|A_{\epsilon}|\text{in}\rangle F_{v,b,d}(\alpha) \quad (5.7.36)$$

où la fonction $F_{v,b,d}(\alpha)$ est :

$$F_{v,b,d}(\alpha) = g^v \left[\frac{\Lambda^2}{s_{\text{rel}}(\alpha) - E_{\text{m}}} \right]^d \langle \delta_{\epsilon}|G_0^{\text{rel}}[s_{\text{rel}}(\alpha)]|\delta_{\epsilon}\rangle^b, \quad (5.7.37)$$

et où la variable de Laplace de la particule relative est :

$$s_{\text{rel}}(\alpha) = s - \epsilon_{\text{m}}^{\alpha}. \quad (5.7.38)$$

Un exemple de calcul d'un diagramme particulier est effectué dans l'annexe 5.E.1. Dans l'équation (5.7.37), $G_0^{\text{rel}}(s)$ est la résolvante d'une particule relative dans un guide d'onde (3.4.2). Quel que soit le diagramme considéré, deux bulles sont toujours séparées soit par une double ligne, soit par un vertex d'interaction directe. En conséquence, les nombres v , b et d vérifient :

$$v + d = b + 1. \quad (5.7.39)$$

De plus, le nombre de diagrammes avec b bulles, d doubles lignes et $v = b + 1 - d$ vertex d'interaction directe est donnée par les coefficients binomiaux :

$$\binom{b+1}{d} = \binom{b+1}{v}. \quad (5.7.40)$$

Pour calculer les éléments de la matrice de transition, il faut donc calculer la somme des fonctions $F_{v,b,d}(\alpha)$ sur tous les diagrammes possible :

$$\sum_{b=0}^{\infty} \sum_{d=0}^{b+1} \binom{b+1}{d} F_{b+1-d,b,d}(\alpha) = \left[\frac{1}{g_{\text{eff}}[s_{\text{rel}}(\alpha)]} - \langle \delta_{\epsilon}|G_0^{\text{rel}}[s_{\text{rel}}(\alpha)]|\delta_{\epsilon}\rangle \right]^{-1}, \quad (5.7.41)$$

où l'on a défini une intensité d'interaction effective :

$$g_{\text{eff}}(s) = g + \frac{\Lambda^2}{s - E_{\text{m}}}. \quad (5.7.42)$$

En utilisant les équations (5.7.36) et (5.7.41), on définit les éléments de la matrice de transition entre les états $\langle \text{out} |$ et $|\text{in} \rangle$:

$$t_2(s) = \langle \text{out} | T_2(s_{\text{rel}}) | \text{in} \rangle, \quad (5.7.43)$$

où l'on retrouve la matrice de transition de la référence [39] rappelée par l'équation (3.4.3) :

$$T_2(s) = \frac{|\delta_\epsilon\rangle\langle\delta_\epsilon|}{\left(g + \frac{\Lambda^2}{s-E_m}\right)^{-1} - \langle\delta_\epsilon|G_0(s)|\delta_\epsilon\rangle} \otimes 1_{\text{com}}. \quad (5.7.44)$$

Cette matrice T est la même si les atomes sont des bosons.

5.7.8 Voie ouverte

Ces différentes règles permettent d'écrire le développement de la fonction de Green pour un atome de la voie ouverte en puissances de l'interaction. En se limitant aux termes qui n'ont qu'un seul propagateur dirigé vers les temps décroissants, on obtient le développement de la figure 5.6. Dans le cas bosonique, le signe « moins » doit être remplacé par un -2 , et les états internes ne doivent pas être pris en compte.

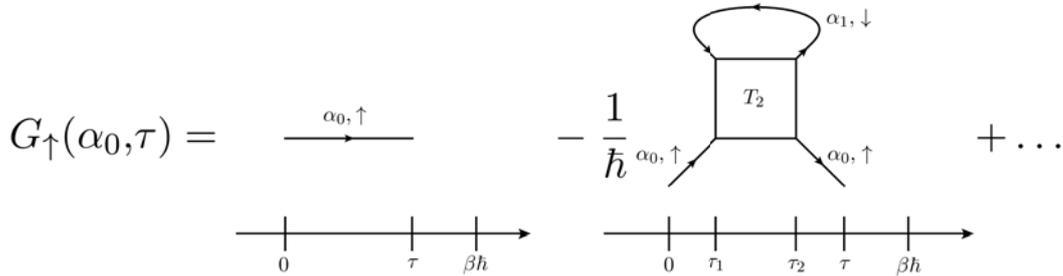


Fig. 5.6 Développement en puissances de l'interaction de la fonction de Green pour un atome en se limitant au terme de la sommation des échelles de la Fig. 5.5.

5.7.9 Voie moléculaire

Le même travail peut être effectué pour la voie moléculaire. En se restreignant aux diagrammes dont les propagateurs sont tous dirigés vers les temps croissants, on trouve le développement de la fonction de Green moléculaire de la Fig. 5.7. Si les atomes sont des bosons, ce même développement diagrammatique est valable sous réserve de ne pas indiquer les états internes des bosons⁹.

9. Dans le calcul, le facteur 2 supplémentaire dû à l'indiscernabilité des bosons est exactement compensé par la définition de l'intensité du couplage de Feshbach $\Lambda/\sqrt{2}$ qui apparaît toujours au carré.

$$\begin{aligned}
G_m(\alpha_0, \tau) = & \quad \begin{array}{c} \xrightarrow{\alpha_0} \\ \hline \end{array} \quad + \quad \begin{array}{c} \alpha_1, \uparrow \\ \xrightarrow{\alpha_0} \quad \text{---} \quad \xrightarrow{\alpha_0} \\ \alpha_2, \downarrow \\ \text{---} \end{array} \\
& \quad \begin{array}{c} | \quad | \quad | \\ \hline 0 \quad \tau \quad \beta h \end{array} \quad \begin{array}{c} | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ \hline 0 \quad \tau_1 \quad \tau_2 \quad \tau \quad \beta h \end{array} \\
- \frac{1}{\hbar} & \quad \begin{array}{c} \alpha_1, \uparrow \\ \xrightarrow{\alpha_0} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \xrightarrow{\alpha_0} \\ \alpha_2, \downarrow \quad \text{---} \quad T_2 \quad \text{---} \quad \alpha'_1, \uparrow \\ \alpha'_2, \downarrow \end{array} \quad + \dots \\
& \quad \begin{array}{c} | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ \hline 0 \quad \tau_1 \quad \tau_2 \quad \tau_3 \quad \tau_4 \quad \tau \quad \beta h \end{array}
\end{aligned}$$

Fig. 5.7 Développement en puissances de l'interaction de la fonction de Green moléculaire en se limitant aux termes de la sommation des échelles. Ce développement est également valable si les atomes sont des bosons à condition dans ce cas de ne pas considérer d'état interne.

5.8 Développement de la densité en puissances de la fugacité

5.8.1 Principe de la méthode

Dans cette partie, nous étendons l'analyse de Xavier Leyronas [37] pour le modèle à deux voies — les principales différences étant l'existence d'une voie fermée bosonique supplémentaire et l'existence d'un confinement dans un guide d'onde. L'idée de la méthode est la suivante :

- ↪ On cherche à calculer les cumulants définis par l'équation (5.3.1).
- ↪ Connaître les cumulants est équivalent à connaître le développement du nombre d'atomes et de molécules en puissances des fugacités [voir l'équation (5.3.15)] .
- ↪ On peut écrire les nombres d'atomes et de molécules avec le formalisme des fonctions de Green [voir l'équation (5.7.9)].
- ↪ On peut écrire grâce au théorème de Wick et au formalisme diagrammatique les fonctions de Green avec uniquement des fonctions de Green sans interaction.
- ↪ Les fonctions de Green sans interaction se développent en puissances des fugacités.
- ↪ On peut alors écrire les cumulants sous la forme de diagrammes de Feynman qu'il suffit alors de calculer.

5.8.2 Nombre d'atomes et de molécules

Dans la voie ouverte, le nombre de fermions d'état interne η (ou de bosons) et celui de molécules de la voie fermée peut s'écrire avec le formalisme des fonctions de Green [voir l'équation (5.3.15) et les diagrammes 5.6 et 5.7]. Ceci peut s'exprimer à l'aide des diagrammes, en notant que l'apparition d'une boucle fermionique dans le diagramme du nombre de fermions \uparrow rajoute un signe « moins », en bouclant sur lui-même le

diagramme de la fonction de Green à une particule, comme sur les figures Fig. 5.8 et Fig. 5.9¹⁰.

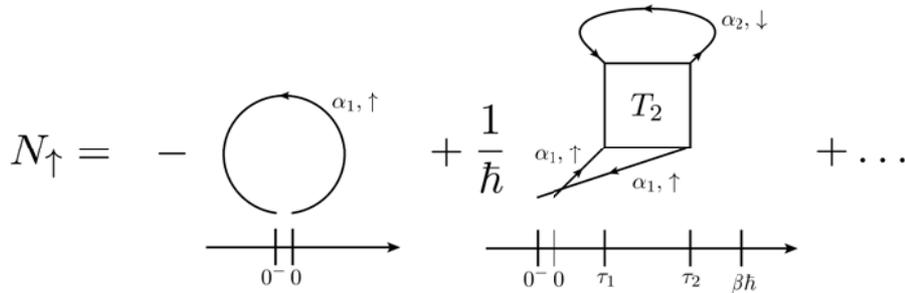


Fig. 5.8 Développement du nombre de fermions \uparrow en puissances de l'interaction. Si les atomes sont des bosons, N se développe de la même façon mais avec un facteur 2 devant le diagramme de droite (celui qui comprend une matrice T_2).

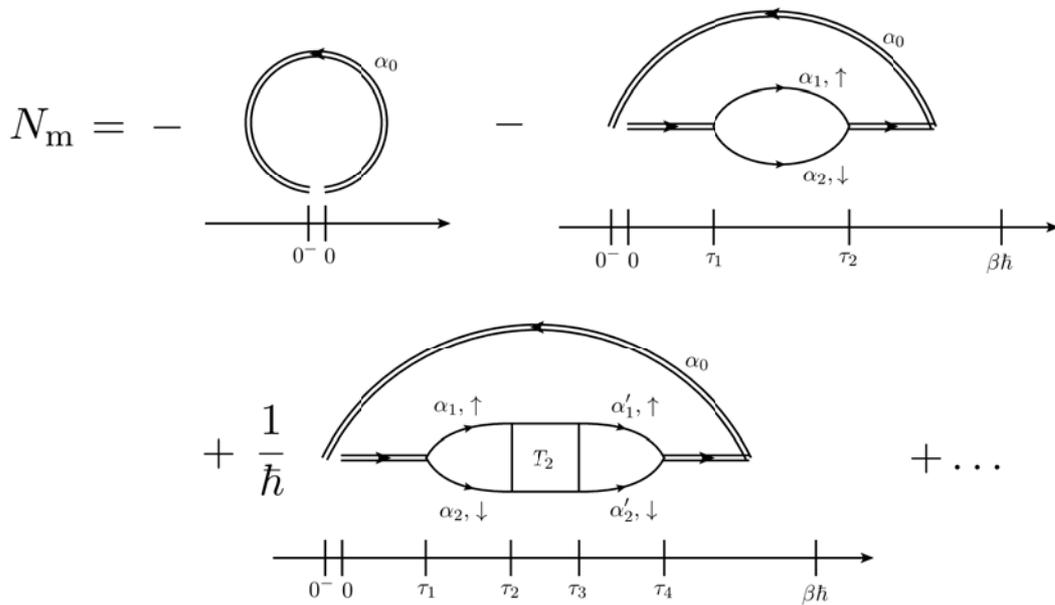


Fig. 5.9 Développement du nombre de molécules en puissances de l'interaction. Si l'espèce atomique est bosonique, ce développement diagrammatique est correct si on ne prend pas en compte l'état interne des atomes.

10. Dans ces deux cas (fermionique ou bosonique), les signes devant les diagrammes sont les mêmes. Cependant, dans le cas fermioniques, ils proviennent de la présence de boucle fermionique, alors que pour les bosons, ils proviennent du signe dans la relation entre le nombre de particule et les fonctions de Green [cf Eq. (5.7.9)].

5.8.3 Développement en puissances de la fugacité

Nous avons vu aux avec les équations (5.7.17) et (5.7.18) que les fonctions de Green sans interaction s'expriment grâce aux statistiques de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac. Ces statistiques se développent en puissances des fugacités dans la limite de haute température où est valable le développement du viriel (5.4.1). On peut donc développer les fonctions de Green sans interactions en puissances des fugacités :

$$G_{\eta}^0(\alpha, \tau) = e^{\mu_{\eta}\tau/\hbar} \left(\sum_{j \geq 0} G_{\eta}^{(0,j)}(\alpha, \tau) z_{\eta}^j \right), \quad (5.8.1)$$

où ces fonctions de Green valent pour des atomes¹¹ :

$$G_{\eta}^{(0,0)}(\alpha, \tau) = -\Theta(\tau) e^{-\epsilon_{\eta}^{\alpha}\tau/\hbar}; \quad G_{\eta}^{(0,j)}(\alpha, \tau) = -[(\pm 1)^j] e^{-\epsilon_{\eta}^{\alpha}(\tau/\hbar + j\beta)}; \quad \eta = b, \uparrow, \downarrow \quad (5.8.2)$$

et sont pour des propagateurs moléculaires :

$$G_{\text{m}}^{(0,0)}(\alpha, \tau) = -\Theta(\tau) e^{-(\epsilon_{\text{m}}^{\alpha} + E_{\text{m}})\tau/\hbar} \quad ; \quad G_{\text{m}}^{(0,j)}(\alpha, \tau) = -e^{-(\epsilon_{\text{m}}^{\alpha} + E_{\text{m}})(\tau/\hbar + j\beta)}. \quad (5.8.3)$$

Avec cette écriture et la présence d'une fonction de Heaviside $\Theta(\tau)$, on se rend compte que les propagateurs à l'ordre zéro $G_{\eta}^{(0,0)}$ sont retardés, dans le sens où ils sont nuls pour des temps négatifs. Lors de l'utilisation de diagrammes de Feynman, il ne sera donc pas possible de dessiner de tels propagateurs dirigés de la droite vers la gauche. Dans le calcul du nombre de particules, seules des diagrammes bouclés sur eux-même apparaîtront. Les préfacteurs exponentiels dans l'équation (5.8.1) se compenseront alors tous et ne sont donc plus considérés dans la suite.

On peut alors développer les nombres de particules en puissances des fugacités des différentes espèces. Il suffit de remplacer dans le calcul de la densité les fonctions de Green sans interaction par leur développement en puissances de la fugacité et de ne garder que les termes ayant la puissance désirée. Un moyen de le faire est de définir diagrammiquement les propagateurs $G_{\eta}^{(0,j)}$ (α, τ) en les notant avec j barres, comme dans les figures 5.10 et 5.11. Pour éviter les confusions entre les fonctions de Green sans interaction G_{η}^0 et leurs développement à l'ordre le plus bas en fugacité $G_{\eta}^{(0,0)}$, ces dernières seront notés avec un exposant « (0) ».

$$\begin{array}{l} \alpha, \uparrow \longrightarrow = \alpha, \uparrow \xrightarrow{(0)} + \alpha, \uparrow \xrightarrow{|} z_{\uparrow} + \alpha, \uparrow \xrightarrow{||} z_{\uparrow}^2 + \dots \\ G_{\uparrow}^0(\alpha, \tau) = G_{\uparrow}^{(0,0)}(\alpha, \tau) + G_{\uparrow}^{(0,1)}(\alpha, \tau) z_{\uparrow} + G_{\uparrow}^{(0,2)}(\alpha, \tau) z_{\uparrow}^2 + \dots \end{array}$$

Fig. 5.10 Développement de la fonction de Green fermionique sans interaction en puissances de la fugacité [voir l'équation (5.8.1)]. Pour des atomes bosoniques, on utilisera les mêmes notations sans indiquer d'état interne.

11. Dans l'utilisation du signe \pm , le signe du haut est valable pour des bosons et celui du bas pour des fermions.

$$\begin{aligned} \overline{\overline{\alpha}} &= \overline{\overline{\alpha}}^{(0)} + \overline{\overline{\alpha}} \text{---} z_{\uparrow} z_{\downarrow} + \overline{\overline{\alpha}} \text{---} (z_{\uparrow} z_{\downarrow})^2 + \dots \\ G_m^0(\alpha, \tau) &= G_m^{(0,0)}(\alpha, \tau) + G_m^{(0,1)}(\alpha, \tau) z_{\uparrow} z_{\downarrow} + G_m^{(0,2)}(\alpha, \tau) (z_{\uparrow} z_{\downarrow})^2 + \dots \end{aligned}$$

Fig. 5.11 Développement de la fonction de Green moléculaire sans interaction en puissances de la fugacité [voir l'équation (5.8.1)].

On peut alors développer, à l'aide de diagrammes, le nombre de particules des différentes espèces en puissances des fugacités en suivant les règles suivantes :

- ★ À cause de l'équilibre chimique, une double ligne barrée compte pour un ordre en $z_{\uparrow} z_{\downarrow}$ pour un système fermionique ou $(z_b)^2$ pour un système bosonique.
- ★ Une interaction ne peut avoir lieu que pour des temps τ tels que $0 < \tau < \beta \hbar$.
- ★ Seuls les propagateurs barrés peuvent être dirigés de la droite vers la gauche.

En suivant ces règles, on obtient les équations diagrammatiques des figures 5.12 qui donnent le développement du nombre d'atomes et de molécules en puissances de la fugacité.

$$\begin{aligned} N_{\uparrow} &= \text{---} \text{---} \text{---} z_{\uparrow} + \frac{1}{\hbar} \text{---} \text{---} \text{---} z_{\uparrow} z_{\downarrow} - \text{---} \text{---} \text{---} z_{\uparrow}^2 + \dots \\ N_m &= \left[\text{---} \text{---} \text{---} - \text{---} \text{---} \text{---} + \frac{1}{\hbar} \text{---} \text{---} \text{---} \right] z_{\uparrow} z_{\downarrow} + \dots \end{aligned}$$

Fig. 5.12 Développement du nombre de fermions \uparrow et de molécules en puissances des fugacités atomiques. Le développement du nombre de particules N_{\downarrow} est identique à celui de N_{\uparrow} en intervertissant les indices \uparrow et \downarrow . Si l'espèce atomique est bosonique, le développement de N est identique à celui de N_{\uparrow} sans indice d'état interne et en ajoutant un facteur 2 devant le diagramme contenant la matrice T_2 à cause de l'indiscernabilité des bosons identiques – les diagrammes concernant le nombre de molécules restent, quant à eux, inchangés, sauf les états internes atomiques qui disparaissent.

5.9 Résultats

5.9.1 Cumulants sans interaction

Les termes du développement du nombres d'atomes et de molécules sans interactions peuvent s'écrire très simplement sous forme diagrammatique (cf Fig. 5.13) :

$$N_{\uparrow} + N_{\downarrow} + 2N_m = \sum_{j \geq 1} \left[- \text{diagramme}_1 - \text{diagramme}_2 - 2 \text{diagramme}_3 (z_{\uparrow} z_{\downarrow})^j \right] + \text{termes avec interactions}$$

Fig. 5.13 Développement diagrammatique des nombres de particules en puissances des fugacités dans le cas fermionique.

$$N + 2N_m = \sum_{j \geq 1} \left[- \text{diagramme}_1 - 2 \text{diagramme}_2 z^{2j} \right] + \text{termes avec interactions}$$

Fig. 5.14 Développement diagrammatique des nombres de particules en puissances des fugacités dans le cas bosonique.

Dans l'égalité de la Fig. 5.13, les diagrammes des termes avec interaction possèdent au moins un propagateur d'un fermion \uparrow et un propagateur d'un fermion \downarrow . Il n'y a donc aucun autre diagramme en z_{\uparrow}^j ou z_{\downarrow}^j dans les termes avec interaction. En comparant la figure 5.13 avec les équations (5.3.14) et (5.3.15), on écrit alors dans la figure 5.15 les cumulants de la forme $b_{j,0}$ et $b_{0,j}$ ainsi que la partie sans interaction des cumulants $b_{j,j}$ sous forme diagrammatique. En effectuant le même raisonnement pour des bosons, on obtient un résultat similaire donné par la figure 5.16. Ces différents diagrammes se

$$b_{j,0} = \frac{-1}{Q_j} \text{diagramme}_1; \quad b_{0,j} = \frac{-1}{Q_j} \text{diagramme}_2; \quad b_{j,j} = \frac{-1}{Q_j} \text{diagramme}_3 + \text{termes avec interactions}$$

Fig. 5.15 Cumulants dans le cas fermionique sans interaction.

$$b_{2p} = \frac{-1}{2pQ} \left[\text{diagramme } \overset{2p}{\circlearrowleft} + 2 \text{diagramme } \overset{p}{\circlearrowleft} \right] + \text{termes avec interactions}; \quad b_{2p+1} = \frac{-1}{(2p+1)Q} \text{diagramme } \overset{2p+1}{\circlearrowleft} + \text{termes avec interactions}$$

Fig. 5.16 Cumulants dans le cas bosonique sans interaction.

calculent grâce à l'équation (5.8.2) et on trouve :

$$b_{j,0} = \frac{1}{Qj} \sum_{\alpha} G_{\uparrow}^{(0,j)}(\alpha, 0^-); \quad b_{0,j} = \frac{1}{Qj} \sum_{\alpha} G_{\downarrow}^{(0,j)}(\alpha, 0^-); \quad b_{j,j} = \frac{-1}{Qj} \sum_{\alpha} G_{\text{m}}^{(0,j)}(\alpha, 0^-) + \dots, \quad (5.9.1)$$

où les « ... » représentent des termes qui n'existent que s'il y a des interactions dans le gaz. On obtient alors exactement les résultats précédents (5.4.3) aussi bien pour un gaz de fermions qu'un gaz de bosons.

5.9.2 La formule de Beth et Uhlenbeck retrouvée

Le cumulant d'ordre le plus bas qui dépend de l'interaction est le coefficient $b_{1,1}$ pour les fermions et b_2 pour les bosons. Afin de les calculer, on développe les nombres de particules en puissances de la fugacité à l'ordre non trivial le plus bas, comme dans la Fig. 5.17 où les terme sans interactions ne sont pas écrits. En comparant le

$$N_{\uparrow} + N_{\downarrow} + 2N_{\text{m}} = \left[\frac{1}{\hbar} \text{diagramme } T_2 + \frac{1}{\hbar} \text{diagramme } T_2 + 2 \left(- \text{diagramme } \overset{\downarrow}{\circlearrowleft} + \frac{1}{\hbar} \text{diagramme } T_2 \right) \right] z_{\uparrow} z_{\downarrow} + \text{termes sans interaction} + \mathcal{O}(z_{\uparrow}^2, z_{\downarrow}^2, z_{\uparrow} z_{\downarrow})$$

Fig. 5.17 Terme en $z_{\uparrow} z_{\downarrow}$ dans la partie avec interactions du développement diagrammatique des nombres de particules en puissances des fugacités. Dans le cas bosonique, le terme de gauche est $N_{\text{b}} + 2N_{\text{m}}$ et les termes de droite sont les même en enlevant les indices états internes. En particulier, le diagramme contenant une matrice T_2 mais ne contenant pas de propagateur moléculaire doit bien être compté deux fois.

développement de la figure 5.17 avec l'équation (5.3.15), on trouve un lien entre ces diagrammes et le coefficient $\Delta b_{1,1}$ (resp. Δb_2) qui est le coefficient $b_{1,1}$ (resp. b_2) avec interactions moins ce même coefficient sans interaction, qui est explicité dans l'égalité de la figure 5.18. Les calculs de ces diagrammes sont détaillés dans l'annexe 5.E et sont

$$\Delta b_{1,1} = \frac{1}{2Q} \left[\frac{1}{\hbar} \left(\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \right) + 2 \left(- \text{Diagram 3} + \frac{1}{\hbar} \text{Diagram 4} \right) \right]$$

Fig. 5.18 Diagrammes valant $\Delta b_{1,1}$. Si le gaz est bosonique, le terme de gauche est Δb_2 et les indices concernant les états internes fermioniques doivent être enlevés (comme dans la Fig. 5.17, le diagramme de gauche doit bien être compté deux fois).

identiques pour les fermions et les bosons. Pour des fermions, on trouve :

$$\Delta b_{1,1} = \left(\frac{M}{m_\uparrow} \right)^{D/2} \left[\int_{C_\gamma} \frac{ds}{2\pi i} \frac{e^{-\beta s} \frac{d}{ds} \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle}{g_{\text{eff}}(s) - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle} - \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi} \frac{|\Lambda|^2 e^{-\beta s} \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle}{(s - E_{\text{mol}})^2} \right. \\ \left. - \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi} \frac{|\Lambda|^2 e^{-\beta s}}{(s - E_{\text{mol}})^2} \frac{[\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle]^2}{g_{\text{eff}}(s) - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle} \right]. \quad (5.9.2)$$

Cette égalité peut se réécrire en :

$$\Delta b_{1,1} = - \left(\frac{M}{m_\uparrow} \right)^{D/2} \left\{ \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2\pi i} e^{-\beta s} \frac{d}{ds} \ln [g_{\text{eff}}(s)] + \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2\pi i} e^{-\beta s} \frac{d}{ds} \ln \left[\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle \right] \right\}. \quad (5.9.3)$$

Il est possible de déformer le contour de Bromwich sur l'axe réel ce qui donne :

$$\left(\frac{m_\uparrow}{M} \right)^{D/2} \Delta b_{1,1} = -e^{-\beta E_{\text{mol}}} + \sum_b \text{Res} \left\{ e^{-\beta s} \frac{d}{ds} \ln \left[\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle \right], s = s_b \right\} \\ - \int_{\frac{(3-D)\hbar\omega}{2}}^{\infty} \frac{ds}{2\pi i} e^{-\beta s} \frac{d}{ds} \ln \left(\frac{\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s + i0^+) | \delta_\epsilon \rangle}{\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s - i0^+) | \delta_\epsilon \rangle} \right). \quad (5.9.4)$$

où s_b sont les zéros de la fonction $\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle$, c'est-à-dire les énergies des dimères en tant que pôles de la matrice de transition dont les énergies sont donc inférieures à $\frac{(3-D)\hbar\omega}{2}$. Cette fonction est étudiée en détail dans la référence [39]. En particulier, le prolongement analytique de cette fonction est tel que :

$$\Re \left[\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s + i0^+) | \delta_\epsilon \rangle \right] = \Re \left[\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s - i0^+) | \delta_\epsilon \rangle \right], \quad (5.9.5)$$

$$\Im \left[\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s + i0^+) | \delta_\epsilon \rangle \right] = -\Im \left[\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s - i0^+) | \delta_\epsilon \rangle \right]. \quad (5.9.6)$$

On peut alors montrer que :

$$\frac{\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s + i0^+) | \delta_\epsilon \rangle}{\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s - i0^+) | \delta_\epsilon \rangle} = e^{-2i\delta(s)}, \quad (5.9.7)$$

où δ est le déphasage défini par l'équation (3.5.14). Les résidus de l'équation (5.9.4) se calculent facilement grâce à la fonction logarithme. Finalement, on trouve la formule de Beth et Uhlenbeck généralisée dans un guide d'onde harmonique de dimension D :

$$\left(\frac{m_{\uparrow}}{M}\right)^{D/2} \Delta b_{1,1} = \sum_b e^{-\beta s_b} + \int_{\frac{(3-D)\hbar\omega_{\perp}}{2}}^{\infty} \frac{ds}{\pi} e^{-\beta s} \frac{d\delta(s)}{ds} - e^{-\beta E_m}. \quad (5.9.8)$$

Pour un gaz de bosons, il suffit de remplacer $\Delta b_{1,1}$ par Δb_2 dans les équations (5.9.2), (5.9.3), (5.9.4) et (5.9.8), et le rapport de masse de l'équation (5.9.8) est $\frac{1}{2}$.

5.9.3 Limite de portée nulle

En utilisant les résultats des chapitres 3 et 5 ainsi que ceux de l'article [39], il est possible d'exprimer la formule de Beth et Uhlenbeck dans un guide d'onde (5.9.8) dans la limite de portée nulle.

Espace tridimensionnel. Dans l'espace tridimensionnel il n'y a pas de guide d'onde et on peut utiliser la formule habituelle de la formule de Beth et Uhlenbeck définie dans les équations (5.5.2) et (5.5.3). Dans cette situation, le déphasage du modèle à deux voies s'exprime :

$$k \cot [\delta(k)] = -\frac{1}{a_{\text{eff}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\right)} + ik \operatorname{erf} \left(\frac{-ik\epsilon}{\sqrt{2}}\right), \quad (5.9.9)$$

où la fonction a_{eff} est définie par l'équation (2.4.3). Dans la limite de portée nulle sans interaction directe ($\epsilon = 0$ et $a_{\text{bg}} = 0$), on obtient le déphasage :

$$k \cot [\delta(k)] = \frac{-1}{a} - R^* k^2. \quad (5.9.10)$$

Dans ce régime, il n'existe pas l'état lié si $a \leq 0$ et il en existe un unique si $a > 0$. Son énergie de liaison s_b est alors [6] :

$$s_b = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\sqrt{1 + \frac{4R^*}{a}} - 1}{2R^*} \right)^2. \quad (5.9.11)$$

La formule de Beth et Uhlenbeck prend alors la forme suivante pour un gaz de fermions :

$$\Delta b_{1,1} = \left(\frac{m_m}{m_{\uparrow}}\right)^{3/2} \times \left[\int_0^{\infty} \frac{dk}{\pi} e^{-\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2\mu}} \frac{\frac{-1}{ak^2} + R^*}{1 + \left(\frac{1}{ak} + R^* k\right)^2} + \begin{cases} e^{-\beta s_b} & \text{pour } a > 0 \\ \text{ou} & \\ 0 & \text{pour } a \leq 0, \end{cases} \right] \quad (5.9.12)$$

et une forme similaire pour un gaz bosonique en remplaçant $\Delta b_{1,1}$ par Δb_2 et m_\uparrow par m_b .

La limite de portée nulle et de résonance large ($\epsilon \rightarrow 0$, $R^* \rightarrow 0$ et $a_{\text{bg}} \neq 0$) est formellement retrouvée en prenant la limite $R^* = 0$ dans les équations (5.9.10) et (5.9.12). Dans cette limite, il existe un unique état lié lorsque $a > 0$ d'énergie $s_b = \frac{-\hbar^2}{2\mu a^2}$.

Dans ces deux limites, l'énergie moléculaire tend vers l'infini par valeur positive ou négative. Dans un cas la contribution moléculaire est nulle, dans l'autre l'état moléculaire n'est pas peuplé et la contribution est considérée comme nulle.

Guide d'onde bidimensionnel. Dans le cas d'un guide d'onde bidimensionnel dans la limite de portée nulle ($\epsilon \rightarrow 0$), le déphasage peut s'exprimer sous la forme :

$$\tan[\delta(\tau)] = \frac{-\pi \left[\frac{(2|\tau|+1)!!}{(2|\tau|)!!} - 1 \right]}{\frac{\sqrt{\pi}a_\perp}{a_{\text{eff}} \left(2\tau\hbar\omega_\perp + \frac{\hbar\omega_\perp}{2} \right)} + \ln\left(\frac{-B}{2\pi\tau}\right) + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(2p-1)!!}{(2p)!!} \ln\left|\frac{p}{p-\tau}\right|}. \quad (5.9.13)$$

où la constante vaut $B \approx 0.9049$ et où l'énergie adimensionnée τ est :

$$E = \left(2\tau + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_\perp. \quad (5.9.14)$$

La formule de Beth et Uhlenbeck fermionique dans cette limite est alors :

$$\left(\frac{m_\uparrow}{M} \right) \Delta b_{1,1} = \sum_b e^{-\beta\hbar\omega_\perp(2\tau_b+1/2)} + e^{-\frac{\beta\hbar\omega_\perp}{2}} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\pi} e^{-2\beta\hbar\omega_\perp\tau} \frac{d\delta(\tau)}{d\tau} - e^{-\beta E_m}. \quad (5.9.15)$$

où les états liés sont les solutions $\tau_b < 0$ de l'équation :

$$\frac{\sqrt{\pi}a_\perp}{a_{\text{eff}} \left(2\tau\hbar\omega_\perp + \frac{\hbar\omega_\perp}{2} \right)} + P_f \int_0^\infty \frac{du}{u} \frac{e^{\tau u}}{\sqrt{1-e^{-u}}} = 0. \quad (5.9.16)$$

Guide d'onde unidimensionnel. Si le système est confiné dans un guide d'onde unidimensionnel dans la limite de portée nulle, le déphasage peut s'exprimer à l'aide de la fonction zeta d'Hurwitz ζ_H :

$$\tan[\delta(\tau)] = \frac{\Im \left[\zeta_H \left(\frac{1}{2}, -\tau - i0^+ \right) \right]}{\frac{a_\perp}{a_{\text{eff}}(2\tau\hbar\omega_\perp + \hbar\omega_\perp)} + \Re \left[\zeta_H \left(\frac{1}{2}, -\tau - i0^+ \right) \right]}. \quad (5.9.17)$$

où l'énergie adimensionnée τ est définie par :

$$E = (2\tau + 1) \hbar\omega_\perp. \quad (5.9.18)$$

On obtient alors la formule suivante si le gaz atomique est constitué de fermions :

$$\left(\frac{m_\uparrow}{M} \right)^{1/2} \Delta b_{1,1} = \sum_b e^{-\beta\hbar\omega_\perp(2\tau_b+1)} + e^{-\beta\hbar\omega_\perp} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\pi} e^{-2\beta\hbar\omega_\perp\tau} \frac{d\delta(\tau)}{d\tau} - e^{-\beta E_m}, \quad (5.9.19)$$

où les états liés d'énergie adimensionnée $\tau_b < 0$ sont solution de

$$\frac{a_\perp}{a_{\text{eff}}(2\tau\hbar\omega_\perp + \hbar\omega_\perp)} + \zeta_H \left(\frac{1}{2}, -\tau \right) = 0. \quad (5.9.20)$$

Annexes du chapitre 5

5.A La formule de Beth et Uhlenbeck

Dans cette annexe nous rappelons le raisonnement de l'article [137], lui-même s'appuyant sur la démonstration de l'article [27], pour un espace de dimension 1, 2 ou 3. Cette méthode permet de calculer efficacement le second coefficient du viriel dans le cadre d'un modèle à une voie comprenant soit uniquement des bosons, soit uniquement des fermions à deux états internes \uparrow ou \downarrow .

Dans le cas particulier du calcul du second cumulant, ce dernier peut être exprimé à l'aide des déphasages de la théorie de la diffusion. Dans le cas d'une interaction séparable, le Hamiltonien peut s'écrire sous la forme :

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{cdm}}^0 + \hat{H}_{\text{rel}}^0 + \hat{V}_{\text{rel}}, \quad (5.A.1)$$

où \hat{H}_{cdm}^0 et \hat{H}_{rel}^0 prennent en compte l'énergie cinétique, ainsi que d'éventuels termes de confinement concernant respectivement le centre de masse et la particule relative, tandis que \hat{V}_{rel} représente l'interaction entre deux particules, soit deux bosons identiques, soit deux fermions d'états interne différents. Les énergies propres E de ce Hamiltonien peuvent alors s'écrire sous la forme :

$$E = E_{\text{cdm}} + E_{\text{rel}}, \quad (5.A.2)$$

où E_{cdm} dépend des variables du centre de masse tandis que E_{rel} dépend des variables relatives. La fonction de partition à deux corps se décompose donc en deux termes aussi bien pour un système bosonique :

$$Q_2 = Q_2^{\text{cdm}} \times Q_2^{\text{rel}} \quad \text{avec} \quad Q_2^{\text{cdm}} = \sum_{\text{cdm}} e^{-\beta E_{\text{cdm}}} \quad \text{et} \quad Q_2^{\text{rel}} = \sum_{\text{rel}} e^{-\beta E_{\text{rel}}}, \quad (5.A.3)$$

que fermionique :

$$Q_{1,1} = Q_{1,1}^{\text{cdm}} \times Q_{1,1}^{\text{rel}} \quad \text{avec} \quad Q_{1,1}^{\text{cdm}} = \sum_{\text{cdm}} e^{-\beta E_{\text{cdm}}} \quad \text{et} \quad Q_{1,1}^{\text{rel}} = \sum_{\text{rel}} e^{-\beta E_{\text{rel}}}, \quad (5.A.4)$$

où les sommes portent sur les états du centre de masse (cdm) ou les états de la particule relative (rel) pour un système de deux bosons identiques ou de deux fermions d'états internes différents. On définit maintenant la différence entre le second cumulant [voir les équations (5.3.7) et (5.3.8)] avec et sans interactions, c'est-à-dire le cas où $\hat{V}_{\text{rel}} = 0$,

dont les grandeurs sont notées avec un exposant (0) :

$$\Delta b_2 = b_2 - b_2^{(0)} = \frac{Q_2^{\text{cdm}}}{Q_1} \left[Q_2^{\text{rel}} - \left(Q_2^{\text{rel}} \right)^{(0)} \right] \quad (5.A.5)$$

$$\Delta b_{1,1} = b_{1,1} - b_{1,1}^{(0)} = \frac{Q_{1,1}^{\text{cdm}}}{Q_{1,0}} \left[Q_{1,1}^{\text{rel}} - \left(Q_{1,1}^{\text{rel}} \right)^{(0)} \right]. \quad (5.A.6)$$

où $\left(Q_2^{\text{rel}} \right)^{(0)}$ [resp. $\left(Q_{1,1}^{\text{rel}} \right)^{(0)}$] est la fonction de partition à 2 corps pour un système de deux bosons identiques (resp. un fermion \uparrow et un fermion \downarrow) sans interactions. Les équations (5.A.5) et (5.A.6), ainsi que tout le raisonnement précédent sont valables quelle que soit la dimension $D = 1, 2$ ou 3 du système bosonique ou fermionique. Dans ce cas, la fonction de partition du centre de masse et la fonction de partition à un corps sont reliées par :

$$\frac{Q_2^{\text{cdm}}}{Q_1} = 2^{D/2} \quad ; \quad \frac{Q_{1,1}^{\text{cdm}}}{Q_{1,0}} = \left(\frac{m_\uparrow + m_\downarrow}{m_\uparrow} \right)^{D/2}, \quad (5.A.7)$$

où ce rapport découle de la masse associée au centre de masse qui est $(2m_b)$ ou $(m_\uparrow + m_\downarrow)$. Finalement, on trouve dans le cas fermionique que :

$$\left(\frac{m_\uparrow + m_\downarrow}{m_\uparrow} \right)^{-D/2} \Delta b_{1,1} = \sum_{\text{états liés } b} e^{-\beta \epsilon_b} + \sum_{\text{états de diffusion } \mathbf{k}_n} \left[e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{k}_n}} - e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{k}_n}^{(0)}} \right], \quad (5.A.8)$$

et dans le cas bosonique, il suffit de remplacer $\Delta b_{1,1}$ par Δb_2 et de considérer des masses telles que $m_\uparrow = m_\downarrow = m_b$. Dans l'équation (5.A.8), ϵ_b est l'énergie de l'état lié à deux corps indicé par b , et $\{\mathbf{k}_n\}$ représente l'ensemble des états relatifs de diffusion d'énergie $\epsilon_{\mathbf{k}_n}$ si le système est considéré avec ses interactions et $\epsilon_{\mathbf{k}_n}^{(0)}$ s'il est sans interactions. Afin de calculer la densité d'état, on place le système dans une sphère de dimension D

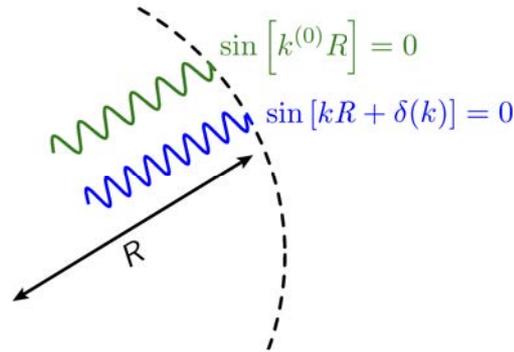


Fig. 5.19 Schéma des fonctions d'onde relatives avec et sans interaction s'annulant aux bords d'une boîte sphérique de rayon R en dimension $D = 3$.

et de rayon R grand devant les longueurs caractéristiques de l'interaction de façon

à ce que les fonctions d'onde relatives s'annulent sur les bords de celle-ci. D'après l'équation (3.1.7), on obtient alors les conditions aux limites suivantes :

$$k_n^{(0)}R + \frac{(3-D)\pi}{4} = n\pi \quad ; \quad k_n R + \delta(k_n) + \frac{(3-D)\pi}{4} = n\pi \quad ; \quad n \in \mathbb{N}, \quad (5.A.9)$$

où les fonctions $\delta(k)$ sont les déphasages de la théorie de la diffusion en dimension D définis par (3.1.7). En notant Δk la différence entre deux vecteurs d'onde successifs, on obtient dans la limite continue :

$$\frac{1}{\Delta k} - \frac{1}{\Delta k^{(0)}} = \frac{1}{\pi} \frac{d\delta(k)}{dk}, \quad (5.A.10)$$

ce qui nous permet d'écrire la formule de Beth et Uhlenbeck qui est valable pour un système strictement tri-, bi- ou unidimensionnel pour un gaz fermionique :

$$\Delta b_{1,1} = \left(\frac{m_\uparrow + m_\downarrow}{m_\uparrow} \right)^{D/2} \left[\sum_{\text{états liés b}} e^{-\beta\epsilon_b} + \int_0^\infty \frac{dk}{\pi} e^{-\frac{\beta\hbar^2 k^2}{2\mu}} \frac{d\delta(k)}{dk} \right]. \quad (5.A.11)$$

Pour un gaz bosonique, la formule de Beth et Uhlenbeck est identique en changeant $\Delta b_{1,1}$ par Δb_2 et avec des masses $m_\uparrow = m_\downarrow = m_b$.

5.B Théorème de Wick

Tout comme dans le cadre des fonctions de Green à température nulle, les fonctions de Green en température non nulle admettent un développement diagrammatique grâce à l'utilisation du théorème de Wick. Cependant, dans le cadre des fonctions de Green en température non nulle, celui-ci s'applique uniquement sur les moyennes statistiques des opérateurs.

Énoncé du théorème de Wick. Soit $\{\hat{A}_i\}_{i=1,n}$ un ensemble de n opérateurs de création et d'annihilation en représentation interaction. Ces opérateurs peuvent être fermioniques ou bosoniques. Le théorème de Wick assure que :

$$\langle T_\tau \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_n \rangle_0 = \sum_{\text{perm.}} \epsilon(1, \alpha \dots, \omega) \langle T_\tau \hat{A}_1 \hat{A}_\alpha \rangle_0 \langle T_\tau \hat{A}_\beta \hat{A}_\gamma \rangle_0 \dots \langle T_\tau \hat{A}_\psi \hat{A}_\omega \rangle_0. \quad (5.B.1)$$

la somme porte sur les permutations et $\epsilon(1, \alpha \dots, \omega)$ est la signature de la permutation entre les configurations restreintes aux fermions $(1, 2 \dots, n)|_{\text{fermion}}$ et $(1, \alpha, \beta \dots, \psi, \omega)|_{\text{fermion}}$ ¹².

5.C Signe de la contribution à l'ordre n de l'interaction directe

Afin de construire les règles de Feynman, il est important de bien comprendre d'où viennent les signes lors du calcul du développement de la fonction de Green. Dans

12. Par exemple si $n = 4$, avec \hat{A}_1 et \hat{A}_2 deux opérateurs bosoniques, \hat{A}_3 et \hat{A}_4 deux opérateurs fermioniques, $(1, 2, 3, 4)|_{\text{fermion}} = (3, 4)$ et $\epsilon(1, 3, 4, 2) = +1$ et $\epsilon(4, 3, 1, 2) = -1$.

ce paragraphe, nous considérons le cas du système fermionique et nous adoptons les notations simplifiées suivantes (on ne tient plus compte des nombres quantiques α) :

$$\hat{a}_{\uparrow,\alpha}^{(\dagger)}(\tau_i) = a_i^{(\dagger)} \quad ; \quad \hat{a}_{\downarrow,\alpha}^{(\dagger)}(\tau_i) = a_{i'}^{(\dagger)} \quad ; \quad \hat{a}_{\uparrow,\alpha}(\tau) = a_{n+1} \quad ; \quad \hat{a}_{\uparrow,\alpha}^\dagger(0) = a_0^\dagger. \quad (5.C.1)$$

Le produit d'opérateur Π qui intervient dans le calcul du terme d'ordre n si on ne prend en compte que l'interaction directe est :

$$\Pi = -(-1)^n T_\tau a_1^\dagger a_1^\dagger a_{1'} a_1 a_2^\dagger a_2^\dagger a_{2'} a_2 \dots a_n^\dagger a_n^\dagger a_{n'} a_n a_{n+1} a_0^\dagger. \quad (5.C.2)$$

Le premier signe vient de la définition de la fonction de Green et le $(-1)^n$ provient du développement de l'opérateur U [voir l'Eq. (5.7.12)]. On peut alors utiliser les règles du produit ordonné en temps pour mettre cette expression sous la forme :

$$\Pi = (-1)^n T_\tau a_1^\dagger a_1 a_{1'}^\dagger a_{1'} a_2^\dagger a_2 a_{2'}^\dagger a_{2'} \dots a_n^\dagger a_n a_{n'}^\dagger a_{n'} a_0^\dagger a_{n+1}, \quad (5.C.3)$$

ce qui peut aussi se réécrire en séparant les opérateurs correspondant à des états internes différents :

$$\Pi = (-1)^n T_\tau a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 \dots a_n^\dagger a_n a_0^\dagger a_{n+1} a_{1'}^\dagger a_{1'} a_{2'}^\dagger a_{2'} \dots a_{n'}^\dagger a_{n'}, \quad (5.C.4)$$

ce qui s'écrit :

$$\Pi = (-1)^n (-1)^n T_\tau a_0^\dagger a_1 a_1^\dagger a_2 a_2^\dagger \dots a_n a_n^\dagger a_{n+1} a_{1'}^\dagger a_{1'} a_{2'}^\dagger a_{2'} \dots a_{n'}^\dagger a_{n'}. \quad (5.C.5)$$

Le nouveau facteur $(-1)^n$ provient des n interversions $a_i^\dagger a_i \rightarrow a_i a_i^\dagger$. Dans le formalisme des fonctions de Green après utilisation du théorème de Wick, le terme sans permutation d'indice de ce produit d'opérateur s'écrit :

$$(-1)^{2n} G_\uparrow^{(0)}(\tau_1 - 0) G_\uparrow^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) \dots G_\uparrow^{(0)}(\tau_n - \tau) G_\downarrow^{(0)}(\tau_1 - \tau_1) \dots G_\downarrow^{(0)}(\tau_n - \tau_n), \quad (5.C.6)$$

ce qui se représente par le diagramme de la Fig. 5.20.

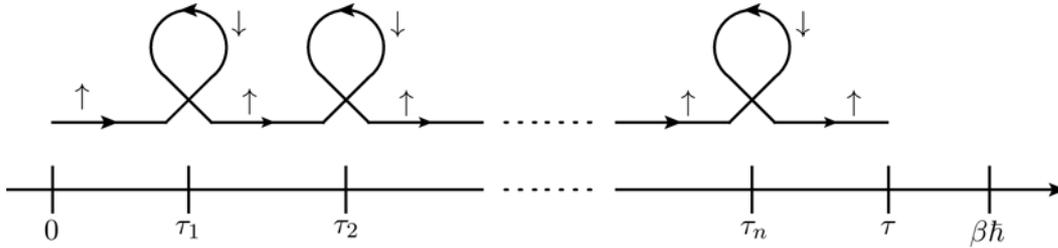


Fig. 5.20 Représentation diagrammatique de l'équation (5.C.6).

On voit que dans ce cas précis, le diagramme de Feynman associé à l'équation (5.C.6) possède exactement n boucles fermioniques. On observe que :

- i) le produit Π dont le diagramme de Feynman associé contient n boucles fermioniques possède un facteur supplémentaire $(-1)^n$.

- ii) en intervertissant dans l'équation (5.C.5) deux opérateurs de création ou deux opérateurs d'annihilation, le produit Π obtient un signe « moins » supplémentaire à cause des règles du produit ordonné en temps.
- iii) le nouveau diagramme de Feynman qui correspondra, après utilisation du théorème de Wick, au terme sans permutation d'indice va posséder une boucle fermionique de plus ou de moins que le diagramme précédent (cf Fig. 5.21).

Par exemple, si on intervertit dans l'équation (5.C.5) les opérateurs $a_{1'}^\dagger$ et $a_{2'}^\dagger$, le terme sans permutation d'indice qui apparaîtra après utilisation du théorème de Wick sera :

$$(-1)^{2n+1} G_{\uparrow}^{(0)}(\tau_1 - 0) \dots G_{\uparrow}^{(0)}(\tau_n - \tau) G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) \dots G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_n - \tau_n), \quad (5.C.7)$$

ce qui peut se représenter par le diagramme de la Fig. 5.21. On en conclut dans les règles de Feynman qu'à une boucle fermionique correspond un signe moins supplémentaire.

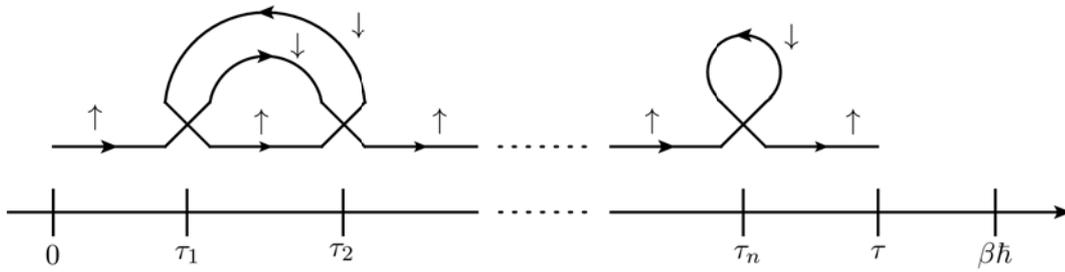


Fig. 5.21 Représentation diagrammatique de l'équation (5.C.7) qui possède une boucle fermionique de moins que le diagramme de la figure 5.20.

5.D Signe de la contribution à l'ordre n du couplage de Feshbach

Dans ce paragraphe, nous considérons uniquement le cas fermionique lorsqu'il n'existe que le couplage de Feshbach. Dans le développement de la fonction de Green d'un fermion \uparrow , les ordres pairs sont les seuls à ne pas être nuls. On note alors $n = 2p$. De plus, nous adoptons les notations simplifiées suivantes :

$$a_{\uparrow,\alpha}(\tau_i) = a_i \quad ; \quad a_{\uparrow,\alpha}^\dagger(\tau_i) = a_i^\dagger \quad ; \quad a_{\downarrow,\alpha}(\tau_i) = a_{i'} \quad ; \quad a_{\downarrow,\alpha}^\dagger(\tau_i) = a_{i'}^\dagger \quad (5.D.1)$$

$$a_{\uparrow,\alpha}(\tau) = a_{n+1} \quad ; \quad a_{\uparrow,\alpha}^\dagger(0) = a_0^\dagger \quad ; \quad a_{m,\alpha}(\tau_i) = b_i \quad ; \quad a_{m,\alpha}^\dagger(\tau_i) = b_i^\dagger. \quad (5.D.2)$$

Le produit d'opérateur Π qui intervient dans le calcul du terme d'ordre n est du type :

$$\Pi = -(-1)^{2p} T_\tau \left(b_1^\dagger a_{1'} a_1 a_2^\dagger a_{2'} b_2 \right) \dots \left(b_{n-1}^\dagger a_{n-1'} a_{n-1} a_n^\dagger a_n^\dagger b_n \right) a_{n+1} a_0^\dagger. \quad (5.D.3)$$

Tout comme dans le cas où la seule interaction est l'interaction directe [cf Eq. (5.C.2)], le signe (-1) provient de la définition de la fonction de Green alors que le facteur $(-1)^{2p}$ découle du développement de l'opérateur U [voir Eq. (5.7.12)]. L'utilisation des

5.E.1 Diagramme 1

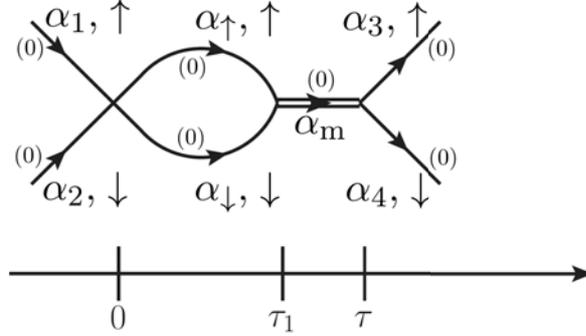


Fig. 5.23 Un diagramme avec une bulle, un vertex et une double ligne.

Afin de calculer la matrice de transition, nous calculons à titre d'exemple le diagramme 5.23 qui est :

$$\frac{g|\Lambda|^2}{\hbar^3} \sum_{\alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow}, \alpha_m} \int_0^{\tau} d\tau_1 \langle \alpha_3, \alpha_4 | A_{\epsilon}^{\dagger} | \alpha_m \rangle \langle \alpha_m | A_{\epsilon} | \alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow} \rangle \langle \alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow} | A_{\epsilon}^{\dagger} A_{\epsilon} | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \times G_m^{(0,0)}(\alpha_m, \tau - \tau_1) G_{\uparrow}^{(0,0)}(\alpha_{\uparrow}, \tau_1) G_{\downarrow}^{(0,0)}(\alpha_{\downarrow}, \tau_1). \quad (5.E.1)$$

On peut effectuer l'intégrale sur le temps τ_1 grâce aux propriétés des transformations de Laplace (voir l'annexe 5.F) :

$$-\frac{g|\Lambda|^2}{\hbar} \sum_{\alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow}, \alpha_m} \int_{\mathcal{C}_{\gamma}} \frac{ds}{2i\pi\hbar} e^{-\tau s/\hbar} \frac{\langle \alpha_3, \alpha_4 | A_{\epsilon}^{\dagger} | \alpha_m \rangle \langle \alpha_m | A_{\epsilon} | \alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow} \rangle \langle \alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow} | A_{\epsilon}^{\dagger} A_{\epsilon} | \alpha_1, \alpha_2 \rangle}{(s - \epsilon_{\uparrow}^{\alpha_{\uparrow}} - \epsilon_{\downarrow}^{\alpha_{\downarrow}})(s - \epsilon_m^{\alpha_m} - E_m)}. \quad (5.E.2)$$

Une relation utile. Le choix particulier de la forme de l'opérateur A_{ϵ} utilisant le ket $|\delta_{\epsilon}\rangle$ permet l'utilisation d'une formule particulière très utile dans les calculs. Si F est une fonction qui ne dépend que de l'énergie de deux particules, on a :

$$\sum_{\alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow}} \langle \alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow} | A_{\epsilon}^{\dagger} | \alpha_{\text{cdm}} \rangle \langle \alpha'_{\text{cdm}} | A_{\epsilon} | \alpha_1, \alpha_2 \rangle F(\epsilon_{\uparrow}^{\alpha_{\uparrow}} + \epsilon_{\downarrow}^{\alpha_{\downarrow}}) = \sum_{\alpha_{\text{rel}}} |\langle \alpha_{\text{rel}} | \delta_{\epsilon} \rangle|^2 \langle \alpha_{\text{cdm}} | \alpha'_{\text{cdm}} \rangle F(\epsilon_{\text{rel}}^{\alpha_{\text{rel}}} + \epsilon_{\text{cdm}}^{\alpha_{\text{cdm}}}), \quad (5.E.3)$$

où les indices rel et cdm font référence aux coordonnées relatives et de centre de masse.

En utilisant l'équation (5.E.3), on peut remplacer la somme sur les variables $\alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow}$ par une somme sur leur variable relative α_{rel} où les énergies cinétiques $\epsilon_{\text{rel}}^{\alpha_{\text{rel}}}$ et $\epsilon_{\text{cdm}}^{\alpha_{\text{cdm}}}$ de la particule relative de masse μ et du centre de masse de masse M sont définies par l'équation (5.2.4) :

$$-\frac{g|\Lambda|^2}{\hbar} \sum_{\alpha_{\text{rel}}, \alpha_{\text{m}}} \int_{\mathcal{C}_\gamma} \frac{ds}{2i\pi\hbar} e^{-\tau s/\hbar} \frac{\langle \alpha_3, \alpha_4 | A_\epsilon^\dagger | \alpha_{\text{m}} \rangle \langle \alpha_{\text{rel}} | \delta_\epsilon \rangle^2 \langle \alpha_{\text{m}} | A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle}{[s_{\text{rel}}(\alpha_{\text{m}}) - \epsilon_{\text{rel}}^{\alpha_{\text{rel}}}] [s_{\text{rel}}(\alpha_{\text{m}}) - E_{\text{m}}]}. \quad (5.E.4)$$

Finalement, la somme sur les variables relatives α_{rel} donnent la résolvante de la partie relative et on obtient

$$-\int_{\mathcal{C}_\gamma} \frac{ds}{2i\pi\hbar^2} e^{-\tau s/\hbar} \sum_{\alpha_{\text{m}}} \langle \alpha_3, \alpha_4 | A_\epsilon^\dagger | \alpha_{\text{m}} \rangle \langle \alpha_{\text{m}} | A_\epsilon | \alpha_1, \alpha_2 \rangle F_{1,1,1}(\alpha_{\text{m}}). \quad (5.E.5)$$

5.E.2 Diagramme 2

Dans cette annexe nous calculons le diagramme de la Fig. 5.24 – le diagramme où sont intervertis les rôles du fermions \uparrow et \downarrow donnant exactement le même résultat. Ce calcul est très similaire à celui effectué dans la référence [37].

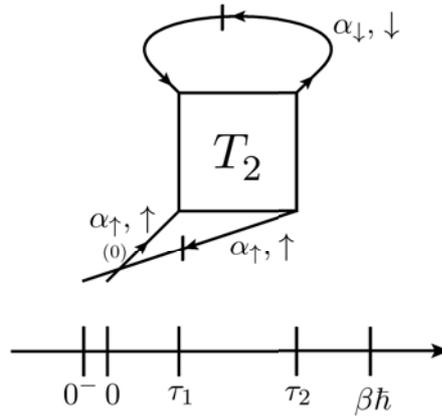


Fig. 5.24 Diagramme calculé dans cette annexe.

Ce diagramme vaut :

$$\sum_{\alpha_\uparrow, \alpha_\downarrow} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 G_\downarrow^{(0,1)}(\alpha_\downarrow, \tau_1 - \tau_2) T_2(\tau_2 - \tau_1) G_\uparrow^{(0,1)}(\alpha_\uparrow, -\tau_2) G_\uparrow^{(0,0)}(\alpha_\uparrow, \tau_1), \quad (5.E.6)$$

les fonction de Green étant définies dans l'équation (5.8.2). On effectue le changement de variable $t_1 = \tau_1$ et $t_2 = \tau_2 - \tau_1$, puis on intègre sur la variable t_1 . On obtient alors :

$$-\sum_{\alpha_\uparrow, \alpha_\downarrow} \int_0^{\hbar\beta} dt_2 T_2(t_2) (\hbar\beta - t_2) e^{-\mathcal{E}(\beta - t_2/\hbar)}, \quad (5.E.7)$$

où l'on a défini ici l'énergie cinétique totale des deux fermions :

$$\mathcal{E} = \epsilon_\uparrow^{\alpha_\uparrow} + \epsilon_\downarrow^{\alpha_\downarrow}. \quad (5.E.8)$$

En utilisant les propriétés de la transformation de Laplace, l'intégrale de l'équation (5.E.7) devient :

$$- \sum_{\alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow}} \int_{C_{\gamma}} \frac{ds}{2\pi i} e^{-\beta s} t_2(s) \frac{1}{(s - \mathcal{E})^2}, \quad (5.E.9)$$

où C_{γ} est le contour de Bromwich du problème, c'est-à-dire une ligne parallèle à l'axe imaginaire de façon à ce que l'intégrande soit analytique à droite de ce contour. Il est possible de découpler les nombres quantiques du centre de masse et de la particule relative :

$$|\alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow}\rangle = \sum_{\alpha_{\text{rel}}, \alpha_{\text{cdm}}} \langle \alpha_{\text{rel}}, \alpha_{\text{cdm}} | \alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow} \rangle | \alpha_{\text{rel}}, \alpha_{\text{cdm}} \rangle. \quad (5.E.10)$$

Dans l'équation (5.E.10), l'énergie associée aux nombres quantiques du centre de masse et de la particule relative doit être égale à celle des deux fermions. Dans le cas où il n'y a pas de guide d'onde, cette relation ne comprend qu'un seul terme :

$$| \mathbf{k}_{\uparrow}, \mathbf{k}_{\downarrow} \rangle = | \mathbf{k}, \mathbf{K} \rangle \quad ; \quad \mathbf{K} = \mathbf{k}_{\uparrow} + \mathbf{k}_{\downarrow} \quad ; \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_{\uparrow} - \mathbf{k}_{\downarrow}}{2}. \quad (5.E.11)$$

Au contraire, s'il le système est confiné dans un guide d'onde, la somme de l'équation (5.E.10) comprendra autant de terme qu'il existe d'états accessibles énergétiquement [15]. Heureusement pour nous, les expressions de ces coefficients ne sont pas nécessaire ici, leur existence suffit. En utilisant l'expression des éléments de la matrice de transition et la relation de fermeture :

$$\sum_{\alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow}} | \alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow} \rangle \langle \alpha_{\uparrow}, \alpha_{\downarrow} | = \mathbb{1}, \quad (5.E.12)$$

on trouve :

$$- \hbar \sum_{\alpha_{\text{rel}}, \alpha_{\text{cdm}}} \int_{C_{\gamma}} \frac{ds}{2\pi i} e^{-\beta s} \frac{1}{(s - \mathcal{E})^2} \frac{|\langle \alpha_{\text{rel}} | \delta_{\epsilon} \rangle|^2}{\frac{1}{g_{\text{eff}}[s_{\text{rel}}(\alpha_{\text{cdm}})]} - \langle \delta_{\epsilon} | G_0^{\text{rel}}[s_{\text{rel}}(\alpha_{\text{cdm}})] | \delta_{\epsilon} \rangle}, \quad (5.E.13)$$

où l'on peut séparer l'énergie \mathcal{E} en une partie pour le centre de masse et une partie pour le mouvement relatif :

$$s - \mathcal{E} = s_{\text{rel}}(\alpha_{\text{cdm}}) - \epsilon_{\text{rel}}^{\alpha_{\text{rel}}}. \quad (5.E.14)$$

L'intégrale sur les variables du centre de masse est direct après avoir effectué le changement de variable :

$$s \rightarrow s_{\text{rel}}(\alpha_{\text{cdm}}). \quad (5.E.15)$$

En remarquant que

$$\sum_{\alpha_{\text{rel}}} \frac{-|\langle \alpha_{\text{rel}} | \delta_{\epsilon} \rangle|^2}{[s - \epsilon_{\text{rel}}^{\alpha_{\text{rel}}}]^2} = \frac{d}{ds} \langle \delta_{\epsilon} | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_{\epsilon} \rangle, \quad (5.E.16)$$

on trouve finalement que le diagramme de la Fig. 5.24 vaut :

$$\hbar \left(\frac{m_{\text{m}}}{m_{\uparrow}} \right)^{D/2} Q \int_{C_{\gamma}} \frac{ds}{2\pi i} \frac{e^{-\beta s} \frac{d}{ds} \langle \delta_{\epsilon} | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_{\epsilon} \rangle}{\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_{\epsilon} | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_{\epsilon} \rangle}. \quad (5.E.17)$$

5.E.3 Diagramme 3

Dans cette annexe nous calculons le diagramme de la Fig. 5.25 qui vaut :

$$\begin{aligned}
 - \sum_{\alpha_m, \alpha_\uparrow, \alpha_\downarrow} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \frac{\Lambda^2}{\hbar^2} |\langle \alpha_m | A_\epsilon | \alpha_\uparrow, \alpha_\downarrow \rangle|^2 G_\downarrow^{(0,0)}(\alpha_\downarrow, \tau_2 - \tau_1) \\
 \times G_\uparrow^{(0,0)}(\alpha_\uparrow, \tau_2 - \tau_1) G_m^{(0,0)}(\alpha_m, \tau_1) G_m^{(0,1)}(\alpha_m, -\tau_2). \quad (5.E.18)
 \end{aligned}$$

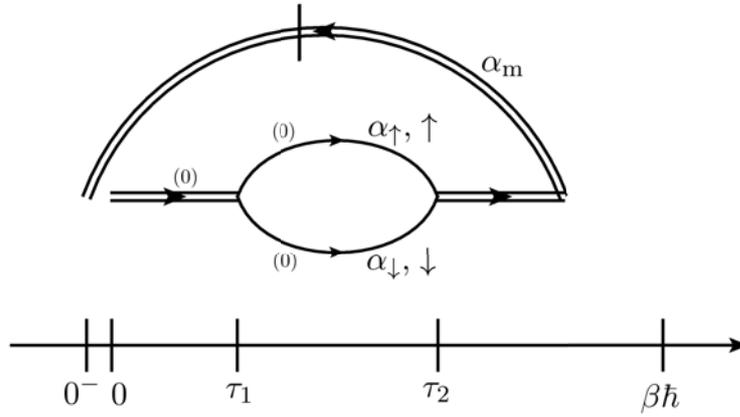


Fig. 5.25 Diagramme calculé dans cette annexe.

Les sommes sur les variables α_\uparrow et α_\downarrow sont effectuées grâce à l'équation (5.E.3), ce qui donne une somme sur les variables relatives α_{rel} . En utilisant le théorème de convolution 5.F.2, on peut effectuer les intégrales sur les temps τ_2 et τ_1 et l'on trouve :

$$- |\Lambda|^2 \sum_{\alpha_m, \alpha_{\text{rel}}} \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi} |\langle \alpha_{\text{rel}} | \delta_\epsilon \rangle|^2 \left[\frac{1}{s_{\text{rel}}(\alpha_m) - E_m} \right]^2 \frac{-e^{-\beta s}}{s_{\text{rel}}(\alpha_m) - \epsilon_{\text{rel}}^{\alpha_{\text{rel}}}}. \quad (5.E.19)$$

On reconnaît la fonction $\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}[s_{\text{rel}}(\alpha_m)] | \delta_\epsilon \rangle$ dans la somme sur les variables relatives α_{rel} :

$$|\Lambda|^2 \sum_{\alpha_m} \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi} \left[\frac{1}{s_{\text{rel}}(\alpha_m) - E_m} \right]^2 e^{-\beta s} \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}[s_{\text{rel}}(\alpha_m)] | \delta_\epsilon \rangle, \quad (5.E.20)$$

et la somme sur les variables du centre de masse α_m s'effectue grâce au changement de variable $s \rightarrow s_{\text{rel}}(\alpha_m)$:

$$|\Lambda|^2 \left(\frac{m_m}{m_\uparrow} \right)^{D/2} Q \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi} \frac{e^{-\beta s} \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle}{(s - E_m)^2}. \quad (5.E.21)$$

5.E.4 Diagramme 4

Le dernier diagramme à calculer est celui de la Fig. 5.26 qui s'évalue :

$$\begin{aligned}
& - \sum_{\{\alpha_i\}} \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_3 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_4 \frac{\Lambda^2}{\hbar^2} \langle \alpha_m | A_\epsilon | \alpha'_\uparrow, \alpha'_\downarrow \rangle \langle \alpha_\uparrow, \alpha_\downarrow | A_\epsilon^\dagger | \alpha_m \rangle G_\uparrow^{(0,0)}(\alpha_\uparrow, \tau_2 - \tau_1) \\
& \times G_\downarrow^{(0,0)}(\alpha_\downarrow, \tau_2 - \tau_1) T_2(\tau_3 - \tau_2) G_\uparrow^{(0,0)}(\alpha'_\uparrow, \tau_4 - \tau_3) G_\downarrow^{(0,0)}(\alpha'_\downarrow, \tau_4 - \tau_3) G_m^{(0,0)}(\alpha_m, \tau_1) G_m^{(0,1)}(\alpha_m, -\tau_4)
\end{aligned} \tag{5.E.22}$$

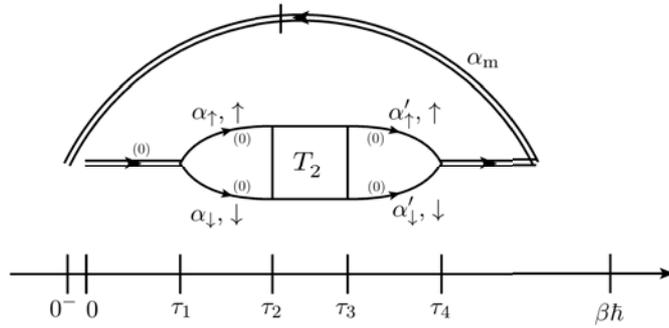


Fig. 5.26 Diagramme calculé dans cette annexe

L'utilisation des propriétés des transformations de Laplace permet de calculer les intégrales sur les temps τ_i . On trouve alors :

$$\begin{aligned}
& - \hbar \sum_{\{\alpha_i\}} \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi} \frac{\Lambda^2 e^{-\beta s} \langle \alpha_m | A_\epsilon | \alpha'_\uparrow, \alpha'_\downarrow \rangle \langle \alpha_\uparrow, \alpha_\downarrow | A_\epsilon^\dagger | \alpha_m \rangle}{[s_{\text{rel}}(\alpha_m) - E_m]^2 (s - \epsilon_\uparrow^{\alpha_\uparrow} - \epsilon_\downarrow^{\alpha_\downarrow}) (s - \epsilon_\uparrow^{\alpha'_\uparrow} - \epsilon_\downarrow^{\alpha'_\downarrow})} \\
& \times \frac{\langle \alpha_\uparrow, \alpha_\downarrow | \delta_\epsilon \rangle \langle \delta_\epsilon | \alpha'_\uparrow, \alpha'_\downarrow \rangle}{\frac{1}{g_{\text{eff}}[s_{\text{rel}}(\alpha_m)]} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}[s_{\text{rel}}(\alpha_m)] | \delta_\epsilon \rangle}
\end{aligned} \tag{5.E.23}$$

En utilisant deux fois les relations de fermetures sur les variables relatives et celles du centre de masse :

$$\sum_{\alpha_{\text{rel}}, \alpha_{\text{cdm}}} |\alpha_{\text{rel}}, \alpha_{\text{cdm}} \rangle \langle \alpha_{\text{rel}}, \alpha_{\text{cdm}} | = \mathbb{1}, \tag{5.E.24}$$

et la relation de fermeture sur les variables des particules \uparrow et \downarrow d'une part, et celle sur les variables \uparrow' et \downarrow' d'autre part, l'expression du diagramme de la Fig. 5.26 devient :

$$\begin{aligned}
& - \hbar \sum_{\alpha_{\text{rel}}, \alpha'_{\text{rel}}, \alpha_m} \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi} \frac{\Lambda^2 e^{-\beta s} \langle \alpha_{\text{rel}} | \delta_\epsilon \rangle \langle \delta_\epsilon | \alpha_{\text{rel}} \rangle}{[s_{\text{rel}}(\alpha_m) - E_m]^2 [s_{\text{rel}}(\alpha_m) - \epsilon_{\text{rel}}^{\alpha_{\text{rel}}}] [s_{\text{rel}}(\alpha_m) - \epsilon_{\text{rel}}^{\alpha'_{\text{rel}}}] } \\
& \times \frac{\langle \alpha'_{\text{rel}} | \delta_\epsilon \rangle \langle \delta_\epsilon | \alpha'_{\text{rel}} \rangle}{\frac{1}{g_{\text{eff}}[s_{\text{rel}}(\alpha_m)]} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}[s_{\text{rel}}(\alpha_m)] | \delta_\epsilon \rangle}.
\end{aligned} \tag{5.E.25}$$

Les sommes sur les variables relatives donnent des fonctions $\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}[s_{\text{rel}}(\alpha_m)] | \delta_\epsilon \rangle$ et celle sur les variables moléculaires sont effectuées grâce au changement de variable $s \rightarrow s_{\text{rel}}(\alpha_m)$. On obtient finalement :

$$- \hbar |\Lambda|^2 \left(\frac{m_m}{m_\uparrow} \right)^{D/2} Q \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi} \frac{e^{-\beta s}}{(s - E_m)^2} \frac{[\langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle]^2}{\frac{1}{g_{\text{eff}}(s)} - \langle \delta_\epsilon | G_0^{\text{rel}}(s) | \delta_\epsilon \rangle}. \quad (5.E.26)$$

5.F Transformation de Laplace

5.F.1 Définitions

Transformée de Laplace. La transformée de Laplace d'une fonction $f(\tau)$ est notée $\text{LT}[f](s)$ et est définie par :

$$\text{LT}[f](s) = \int_0^\infty d\tau e^{s\tau/\hbar} f(\tau). \quad (5.F.1)$$

Cette définition est la même que dans la référence [37] et diffère d'un signe « moins » des définitions habituelles. Grâce à ce choix, on retrouve directement les expressions habituelles des propagateurs.

Transformée de Laplace inverse. La transformée de Laplace inverse est donnée par

$$f(\tau) = \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi\hbar} e^{-s\tau/\hbar} \text{LT}[f](s), \quad (5.F.2)$$

où C_γ est le contour de Bromwich du problème, c'est-à-dire une ligne parallèle à l'axe imaginaire qui laisse l'intégrande analytique à gauche de cette ligne.

5.F.2 Théorème de convolution

Théorème pour deux fonctions. Soient deux fonctions $f_1(\tau)$ et $f_2(\tau)$ retardées, *i.e.* :

$$f_1(\tau \leq 0) = f_2(\tau \leq 0) = 0. \quad (5.F.3)$$

Le théorème de convolution assure que :

$$\int dt f_1(\beta\hbar - t) f_2(t) = \int_{C_\gamma} \frac{ds}{2i\pi\hbar} e^{-\beta s} \text{LT}[f_1](s) \text{LT}[f_2](s), \quad (5.F.4)$$

où le contour de Bromwich est défini dans le paragraphe précédent.

Cas particulier. Pour un ensemble de réels positifs (ϵ_i) et un réel positif τ , on a l'égalité suivante :

$$\begin{aligned} \text{LT} \left[\int_0^\tau d\tau_1 \int_{\tau_1}^\tau d\tau_2 \dots \int_{\tau_{N-1}}^\tau d\tau_N e^{-\epsilon_1 \tau_1/\hbar} e^{-\epsilon_2 (\tau_2 - \tau_1)/\hbar} \dots e^{-\epsilon_{N+1} (\tau - \tau_N)/\hbar} \right] (s) \\ = \prod_{i=1}^{N+1} \frac{(-\hbar)^{N+1}}{s - \epsilon_i}. \end{aligned} \quad (5.F.5)$$

Démonstration. On effectue un changement de variable :

$$t_1 = \tau_1 \quad ; \quad t_i = \tau_i - \tau_{i-1} \quad , \text{ pour } 2 \leq i \leq N, \quad (5.F.6)$$

dont le jacobien¹³ est 1. L'intégrale de l'équation (5.F.5) est alors

$$\begin{aligned} & \int_0^\tau d\tau_1 \dots \int_{\tau_{N-1}}^\tau d\tau_N e^{-\epsilon_1 \tau_1 / \hbar} \dots e^{-\epsilon_{N+1} (\tau - \tau_N) / \hbar} \\ &= \int_{\mathbb{R}^N} \left(\prod_{i=1}^N dt_i e^{-\frac{\epsilon_i t_i}{\hbar}} \Theta(t_i) \right) e^{-\frac{\epsilon_{N+1} (\tau - \sum_i t_i)}{\hbar}} \Theta \left(\tau - \sum_i t_i \right), \end{aligned} \quad (5.F.7)$$

où $\Theta(t)$ est la fonction de Heaviside. En utilisant la définition de la transformation de Laplace, le membre de gauche de l'équation (5.F.5) devient :

$$\int_{\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^N} d\tau e^{s\tau / \hbar} \left(\prod_{i=1}^N dt_i e^{-\epsilon_i t_i / \hbar} \Theta(t_i) \right) e^{-\epsilon_{N+1} (\tau - \sum_i t_i) / \hbar} \Theta \left(\tau - \sum_i t_i \right). \quad (5.F.8)$$

On effectue ensuite le changement de variable :

$$t_{N+1} = \tau - \sum_i t_i, \quad (5.F.9)$$

de façon à ce que les différentes intégrales se découpent. Finalement, chaque intégrale restante se calcule directement :

$$\prod_{i=1}^{N+1} \int_0^\infty dt_i e^{(s - \epsilon_i) t_i / \hbar} = \prod_{i=1}^{N+1} \frac{(-\hbar)^{N+1}}{s - \epsilon_i}. \quad (5.F.10)$$

13. La matrice jacobienne étant triangulaire, son déterminant est simple à évaluer.

Conclusion

Les systèmes physiques en dimensions réduites sont passionnants à étudier car leurs propriétés diffèrent, parfois très fortement, de celles des systèmes tridimensionnels. Ceci est particulièrement vrai pour les gaz d'atomes froids où ces régimes de dimension réduite sont atteints expérimentalement en confinant de façon très anisotrope le gaz.

Les liens entre les propriétés de dimensions réduites et le confinement sont alors fondamentaux, et les descriptions théoriques strictement uni- ou bidimensionnel ne sont pas toujours pertinentes. Pour cette raison, nous avons étudié tout au long de ce manuscrit différentes propriétés d'atomes froids piégés dans un guide d'onde uni- ou bidimensionnel, dont la forme est proche de celle des expériences, aussi bien au voisinage qu'en dehors d'une résonance de diffusion. Nous avons pour cela utilisé un modèle à deux voies permettant de prendre en compte les paramètres pertinents de la résonance de Feshbach. Nous avons alors étudié les collisions et les dimères dans cette configuration. En particulier, à partir du modèle à deux voies dans un guide d'onde, nous avons déterminé les domaines de validité de modèles strictement uni- ou bidimensionnels, ainsi que les liens entre les paramètres de ces différents modèles [39].

L'étude du problème à trois corps dans un guide d'onde est un sujet ouvert et fascinant pour lequel le modèle à deux voies pourrait apporter de nombreuses réponses. En particulier, les états d'Efimov [4, 139, 140] n'existent pas en dimension réduite pour des interactions à courte portée et sont très bien décrits par le modèle à deux voies [65]. L'étude de la transition entre les états d'Efimov et les deux états universels à deux dimensions a déjà été menée [15], mais ni la transition vers un système unidimensionnel, ni la signature des molécules de Feshbach n'a encore jamais été examinée.

Nous avons également mis en lumière certaines résonances unidimensionnelles au voisinage desquels il existe un dimère de basse énergie (par rapport à l'énergie typique du confinement du piège). Ce dimère ne peut pas être décrit avec un modèle de contact de Wigner-Bethe-Peierls, mais l'est très bien avec un modèle de portée effective. Nous avons alors étudié le problème à trois corps (bosonique et fermionique) dans un espace strictement unidimensionnel, car celui-ci est au cœur de la notion d'intégrabilité, et peut donc avoir des conséquences directes sur les propriétés de thermalisation du gaz atomique. Pour des résonances qui peuvent être décrites par un modèle de portée effective unidimensionnel [88, 39], nous avons montré lorsqu'il existe un état lié à deux corps que l'ansatz de Bethe n'est pas un état propre exact du modèle à deux voies et que par conséquent ces systèmes bosonique et fermionique ne sont pas intégrables [43]. Nous avons alors étudié l'écart à l'intégrabilité de ces systèmes. La suite logique de cette analyse serait ainsi d'étudier le problème à n corps dans ces modèles.

Dans une dernière partie de ce manuscrit, nous nous sommes intéressé au déve-

loppement du viriel d'un gaz confiné dans un guide d'onde. Après avoir adapté les définitions des quantités thermodynamiques importantes pour le modèle à deux voies, nous avons démontré une généralisation de la formule de Beth et Uhlenbeck pour un gaz confiné dans un guide d'onde avec un modèle d'interaction incluant les molécules de Feshbach. Pour cela, nous avons utilisé une méthode diagrammatique que nous avons adaptée à ce modèle. Afin de prolonger ces résultats, il serait fructueux d'exploiter la formule de Beth et Uhlenbeck prédite avec le modèle à deux voies sur des cas particuliers et de comparer ces prévisions avec des mesures expérimentales. Pour aller plus loin, la connaissance du troisième coefficient du viriel pour un gaz confiné dans un guide d'onde devrait améliorer significativement l'adéquation entre développement du viriel et expériences.

Finalement, en plus des interactions de courtes portées présentées dans ce manuscrit, les systèmes atomiques peuvent interagir *via* une interaction dipolaire, qui est à la fois anisotrope et à longue portée. Il s'agit là de deux caractéristiques très différentes des interactions décrites dans ce manuscrit. Pour réaliser de tels gaz, on utilise soit des atomes ayant intrinsèquement un grand moment dipolaire [141, 142, 143], soit des molécules hétéroatomiques [144]. Le rôle des dimensions réduites dans ces systèmes est actuellement très étudié [145, 146]. En particulier, l'étude du problème à petit nombre de corps en interaction dipolaire prédit des effets remarquables [147] et constitue une continuation naturelle de cette thèse.

Bibliographie

- [1] QGLD, “Proceedings of the school Quantum Gases in Low Dimensions,” J. Phys. IV **116** (2004).
- [2] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, et E. Tiesinga, “Feshbach resonances in ultracold gases,” Rev. Mod. Phys. **82**, 1225–1286 (2010).
- [3] L. P. Pitaevskii et S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation* (Clarendon Press, 2003).
- [4] V. Efimov, “Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system,” Phys. Lett. B **33**, 563–564 (1970).
- [5] V. Efimov, “Weakly-bound states of three resonantly-interacting particles,” Sov. J. Nucl. Phys **12**, 589–595 (1971).
- [6] D. Petrov, “Three-Boson Problem near a Narrow Feshbach Resonance,” Phys. Rev. Lett. **93**, 143201 (2004).
- [7] A. Gogolin, C. Mora, et R. Egger, “Analytical Solution of the Bosonic Three-Body Problem,” Phys. Rev. Lett. **100**, 140404 (2008).
- [8] L. Pricoupenko, “Many Bosons in a Narrow Magnetic Feshbach Resonance,” Phys. Rev. Lett. **110**, 180402 (2013).
- [9] L. Tonks, “The complete equation of state of one, two and three-dimensional gases of hard elastic spheres,” Phys. Rev. **50**, 955–963 (1936).
- [10] M. Girardeau, “Relationship between systems of impenetrable bosons and fermions in one dimension,” J. Math. Phys. **1**, 516 (1960).
- [11] T. Kinoshita, T. Wenger, et D. S. Weiss, “Observation of a One-Dimensional Tonks-Girardeau Gas,” Science (80-.). **305**, 1125–1128 (2004).
- [12] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, I. Bloch, S. Foelling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hansch, et I. Bloch, “Tonks-Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice,” Nature **429**, 277–281 (2004).
- [13] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, et S. Giorgini, “Beyond the Tonks-Girardeau Gas: Strongly Correlated Regime in Quasi-One-Dimensional Bose Gases,” Phys. Rev. Lett. **95**, 190407 (2005).
- [14] E. Haller, M. Gustavsson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, et H.-C. Nägerl, “Realization of an excited, strongly correlated quantum gas phase.” Science **325**, 1224–1227 (2009).

- [15] J. Levinsen, P. Massignan, et M. M. Parish, “Efimov Trimers under Strong Confinement,” *Phys. Rev. X* **4**, 031020 (2014).
- [16] M. Olshanii, “Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons,” *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938–941 (1998).
- [17] T. Bergeman, M. Moore, et M. Olshanii, “Atom-Atom Scattering under Cylindrical Harmonic Confinement: Numerical and Analytic Studies of the Confinement Induced Resonance,” *Phys. Rev. Lett.* **91**, 163201 (2003).
- [18] D. S. Petrov, M. Holzmann, et G. V. Shlyapnikov, “Bose-Einstein Condensation in Quasi-2D Trapped Gases,” *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2551–2555 (2000).
- [19] D. S. Petrov et G. V. Shlyapnikov, “Interatomic collisions in a tightly confined Bose gas,” *Phys. Rev. A* **64**, 012706 (2001).
- [20] E. Lieb et W. Liniger, “Exact analysis of an interacting Bose gas. I. The general solution and the ground state,” *Phys. Rev.* **130** (1963).
- [21] E. Lieb, “Exact analysis of an interacting Bose gas. II. The excitation spectrum,” *Phys. Rev.* **130** (1963).
- [22] V. A. Yurovsky et M. Olshanii, “Restricted thermalization for two interacting atoms in a multimode harmonic waveguide,” *Phys. Rev. A* **81**, 043641 (2010).
- [23] D. S. Petrov, V. Lebedev, et J. T. M. Walraven, “Controlling integrability in a quasi-one-dimensional atom-dimer mixture,” *Phys. Rev. A* **85**, 062711 (2012).
- [24] S. Nascimbène, N. Navon, K. J. Jiang, F. Chevy, et C. Salomon, “Exploring the thermodynamics of a universal Fermi gas.” *Nature* **463**, 1057–1060 (2010).
- [25] S. Nascimbène, N. Navon, F. Chevy, et C. Salomon, “The equation of state of ultracold Bose and Fermi gases: A few examples,” *New J. Phys.* **12**, 103026 (2010).
- [26] M. Horikoshi, S. Nakajima, M. Ueda, et T. Mukaiyama, “Measurement of universal thermodynamic functions for a unitary Fermi gas.” *Science* **327**, 442–5 (2010).
- [27] E. Beth et G. Uhlenbeck, “The quantum theory of the non-ideal gas. II. Behaviour at low temperatures,” *Physica* p. 915–924 (1937).
- [28] P. Grüter et F. Laloë, “Ursell operators in statistical physics I: Generalizing the Beth Uhlenbeck formula,” *J. Phys. I* **5**, 181–203 (1995).
- [29] P. Grüter et F. Laloë, “Ursell Operators in Statistical Physics II: Microscopic Properties of a Dilute Quantum Gas,” *J. Phys. I* **5**, 1255–1279 (1995).
- [30] P. Grüter, “Contribution à la Théorie des Gaz Dilués-Dégénérés,” Thèse de doctorat (1996).
- [31] P. Grüter, F. Laloë, A. E. Meyerovich, et W. Mullin, “Ursell Operators in Statistical Physics III: Thermodynamic Properties of Degenerate Gases,” *J. Phys. I* **7**, 485–508 (1997).
- [32] Y. Castin et F. Werner, “Le troisième coefficient du viriel du gaz de Bose unitaire,” *Can. J. Phys.* **91**, 382–389 (2013).
- [33] X.-J. Liu, H. Hu, et P. Drummond, “Virial Expansion for a Strongly Correlated Fermi Gas,” *Phys. Rev. Lett.* **102**, 160401 (2009).

- [34] D. Rakshit, K. M. Daily, et D. Blume, “Natural and unnatural parity states of small trapped equal-mass two-component Fermi gases at unitarity and fourth-order virial coefficient,” *Phys. Rev. A* **85**, 033634 (2012).
- [35] C. Gao, S. Endo, et Y. Castin, “The third virial coefficient of a two-component unitary Fermi gas across an Efimov-effect threshold,” *EPL (Europhysics Lett.)* **109**, 16003 (2015).
- [36] S.-G. Peng, S.-H. Zhao, et K. Jiang, “Virial expansion of a harmonically trapped Fermi gas across a narrow Feshbach resonance,” *Phys. Rev. A* **89**, 013603 (2014).
- [37] X. Leyronas, “Virial expansion with Feynman diagrams,” *Phys. Rev. A* **84**, 053633 (2011).
- [38] V. Ngampruetikorn, J. Levinsen, et M. M. Parish, “Pair Correlations in the Two-Dimensional Fermi Gas,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 265301 (2013).
- [39] T. Kristensen et L. Pricoupenko, “Ultracold-atom collisions in atomic waveguides: A two-channel analysis,” *Phys. Rev. A* **91**, 042703 (2015).
- [40] R. Qi et X. Guan, “Many-body properties of quasi-one-dimensional boson gas across a narrow CIR,” *EPL* **101**, 40002 (2013).
- [41] A. Imambekov, A. a. Lukyanov, L. I. Glazman, et V. Gritsev, “Exact Solution for 1D Spin-Polarized Fermions with Resonant Interactions,” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 040402 (2010).
- [42] V. Gurarie, “One-dimensional gas of bosons with Feshbach-resonant interactions,” *Phys. Rev. A* **73**, 033612 (2006).
- [43] T. Kristensen et L. Pricoupenko, “One-dimensional ultracold atomic gases: impact of the effective range on integrability,” HAL p. 01162510 (2015).
- [44] C. Cohen-Tannoudji, *Cours au Collège de France* (1998). <http://www.phys.ens.fr/~cct/college-de-france/1998-99/1998-99.htm>.
- [45] J. Dalibard, “Collisional dynamics of ultra-cold atomic gases,” dans “Proc. Int. Sch. Phys. - Enrico Fermi,” (IOS Press, M. Inguscio S. Stringari, and C.E. Wieman Eds., 1999), p. 1–29.
- [46] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics Non-relativistic Theory* (Pergamon, Oxford, 1991).
- [47] L. Pricoupenko, “Isotropic contact forces in arbitrary representation: Heterogeneous few-body problems and low dimensions,” *Phys. Rev. A* **83**, 062711 (2011).
- [48] L. Pricoupenko, *Few-body problem in ultra-cold atoms* (Université d’hiver de Chlef, Chlef, 2012).
- [49] C. D’Errico, M. Zaccanti, M. Fattori, G. Roati, M. Inguscio, G. Modugno, et A. Simoni, “Feshbach resonances in ultracold 39 K,” *New J. Phys.* **9**, 223 (2007).
- [50] S. Saeidian, V. Melezhik, et P. Schmelcher, “Multichannel atomic scattering and confinement-induced resonances in waveguides,” *Phys. Rev. A* **77**, 042721 (2008).
- [51] A. Simoni, J. M. Launay, et P. Soldán, “Feshbach resonances in ultracold atom-molecule collisions,” *Phys. Rev. A* **79**, 032701 (2009).
- [52] Z. Idziaszek, T. Calarco, P. S. Julienne, et A. Simoni, “Quantum theory of ultracold atom-ion collisions,” *Phys. Rev. A* **79**, 010702 (2009).

- [53] S. Kotochigova, E. Tiesinga, et P. S. Julienne, “Multi-channel modelling of the formation of vibrationally cold polar KRb molecules,” *New J. Phys.* **11**, 055043 (2009).
- [54] Z. Idziaszek, A. Simoni, T. Calarco, et P. S. Julienne, “Multichannel quantum-defect theory for ultracold atom-ion collisions,” *New J. Phys.* **13**, 083005 (2011).
- [55] V. S. Melezhik et P. Schmelcher, “Multichannel effects near confinement-induced resonances in harmonic waveguides,” *Phys. Rev. A* **84**, 042712 (2011).
- [56] S. Saeidian, V. S. Melezhik, et P. Schmelcher, “Shifts and widths of Feshbach resonances in atomic waveguides,” *Phys. Rev. A* **86**, 062713 (2012).
- [57] D. J. Papoular, S. Bize, a. Clairon, H. Marion, S. J. J. M. F. Kokkelmans, et G. V. Shlyapnikov, “Feshbach resonances in cesium at ultralow static magnetic fields,” *Phys. Rev. A* **86**, 040701 (2012).
- [58] B. J. Verhaar et S. J. J. M. F. Kokkelmans, “Stability of triplet rubidium ground-state molecules,” arxiv p. 1412.5799v1 (2014).
- [59] B. Gao, “Solutions of the Schrödinger equation for an attractive $1/r^6$ potential,” *Phys. Rev. A* **58**, 1728–1734 (1998).
- [60] B. Gao, “Quantum-defect theory of atomic collisions and molecular vibration spectra,” *Phys. Rev. A* **58**, 4222–4225 (1998).
- [61] M. Jona-Lasinio, L. Pricoupenko, et Y. Castin, “Three fully polarized fermions close to a p-wave Feshbach resonance,” *Phys. Rev. A* **77**, 043611 (2008).
- [62] E. Wigner, “Über die Streuung von Neutronen an Protonen.” *Zeitungs fur Phys.* **83**, 253–258 (1933).
- [63] H. Bethe et R. Peierls, “Quantum Theory of the Diplon,” *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* **148**, 146–156 (1935).
- [64] Y. Castin, “Exact scaling transform for a unitary quantum gas in a time dependent harmonic potential,” *Comptes Rendus Phys.* **5**, 407–410 (2004).
- [65] M. Jona-Lasinio et L. Pricoupenko, “Three Resonant Ultracold Bosons: Off-Resonance Effects,” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 023201 (2010).
- [66] L. Pricoupenko et M. Jona-Lasinio, “Ultracold bosons in the vicinity of a narrow resonance: Shallow dimer and recombination,” *Phys. Rev. A* **84**, 062712 (2011).
- [67] G. B. Partridge, K. E. Strecker, R. I. Kamar, M. W. Jack, et R. G. Hulet, “Molecular Probe of Pairing in the BEC-BCS Crossover,” *Phys. Rev. Lett.* **95**, 020404 (2005).
- [68] F. Werner, L. Tarruell, et Y. Castin, “Number of closed-channel molecules in the BEC-BCS crossover,” *Eur. Phys. J. B* **68**, 401–415 (2009).
- [69] a. J. Moerdijk, B. J. Verhaar, et A. Axelsson, “Resonances in ultracold collisions of ^6Li , ^7Li , and ^{23}Na ,” *Phys. Rev. A* **51**, 4852–4861 (1995).
- [70] M. Holland, S. Kokkelmans, M. Chiofalo, et R. Walser, “Resonance Superfluidity in a Quantum Degenerate Fermi Gas,” *Phys. Rev. Lett.* **87**, 120406 (2001).
- [71] C. Mora, Y. Castin, et L. Pricoupenko, “Integral equations for the four-body problem,” *Comptes Rendus Phys.* **12**, 71–85 (2011).

- [72] L. Pricoupenko, “Modified scalar product for the effective range approach: the molecular contribution,” arXiv :quant-ph p. 1110.5139 (2011).
- [73] L. Pricoupenko, *Interactions, petits nombres de corps et dimensions réduites dans les atomes froids* (Thèse de HDR, 2011).
- [74] J. B. McGuire, “Study of Exactly Soluble One-Dimensional N-Body Problems,” J. Math. Phys. **5**, 622 (1964).
- [75] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T. W. Hänsch, et T. Esslinger, “Exploring Phase Coherence in a 2D Lattice of Bose-Einstein Condensates,” Phys. Rev. Lett. **87**, 160405 (2001).
- [76] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl, et T. Esslinger, “Exciting Collective Oscillations in a Trapped 1D Gas,” Phys. Rev. Lett. **91**, 250402 (2003).
- [77] D. Clément, N. Fabbri, L. Fallani, C. Fort, et M. Inguscio, “Exploring Correlated 1D Bose Gases from the Superfluid to the Mott-Insulator State by Inelastic Light Scattering,” Phys. Rev. Lett. **102**, 155301 (2009).
- [78] N. Fabbri, M. Panfil, D. Clément, L. Fallani, M. Inguscio, C. Fort, et J.-S. Caux, “Dynamical structure factor of one-dimensional Bose gases: Experimental signatures of beyond-Luttinger-liquid physics,” Phys. Rev. A **91**, 043617 (2015).
- [79] F. Meinert, M. Panfil, M. J. Mark, K. Lauber, J.-S. Caux, et H.-C. Nägerl, “Probing the Excitations of a Lieb-Liniger Gas from Weak to Strong Coupling,” ArXiv (2015).
- [80] S. Stock, Z. Hadzibabic, B. Battelier, M. Cheneau, et J. Dalibard, “Observation of Phase Defects in Quasi-Two-Dimensional Bose-Einstein Condensates,” Phys. Rev. Lett. **95**, 190403 (2005).
- [81] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, et J. Dalibard, “Berezinskii-Kosterlitz-Thouless crossover in a trapped atomic gas.” Nature **441**, 1118–21 (2006).
- [82] T. Yefsah, R. Desbuquois, L. Chomaz, K. J. Günter, et J. Dalibard, “Exploring the Thermodynamics of a Two-Dimensional Bose Gas,” Phys. Rev. Lett. **107**, 130401 (2011).
- [83] D. Rychtarik, B. Engeser, H. C. Nägerl, et R. Grimm, “Two-dimensional Bose-Einstein condensate in an optical surface trap,” Phys. Rev. Lett. **92**, 173003 (2004).
- [84] M. Hammes, D. Rychtarik, H.-C. Nägerl, et R. Grimm, “Cold-atom gas at very high densities in an optical surface microtrap,” Phys. Rev. A **66**, 051401 (2002).
- [85] M. Hammes, D. Rychtarik, B. Engeser, H.-C. Nägerl, et R. Grimm, “Evanescent-wave trapping and evaporative cooling of an atomic gas at the crossover to two dimensions.” Phys. Rev. Lett. **90**, 173001 (2003).
- [86] H. Perrin, *Condensats de Bose-Einstein, champs évanescents et champs radio-fréquences* (Thèse de HDR, 2008). <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00355511v2>.
- [87] H. Perrin, Y. Colombe, B. Mercier, V. Lorent, et C. Henkel, “Diffuse reflection of a Bose-Einstein condensate from a rough evanescent wave mirror,” J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **39**, 4649–4658 (2006).

- [88] L. Pricoupenko, “Resonant Scattering of Ultracold Atoms in Low Dimensions,” *Phys. Rev. Lett.* **100**, 170404 (2008).
- [89] E. A. Abbott, *Flatland : une aventure à plusieurs dimensions* (Denoël, 1984). <http://www.geom.uiuc.edu/~banchoff/Flatland/>.
- [90] G. N. Watson, “Three Triple Integrals,” *Q. J. Math.* **10**, 266–276 (1939).
- [91] W. H. McCrea et F. J. W. Whipple, “XXII.—Random Paths in Two and Three Dimensions.” *Proc. R. Soc. Edinburgh* **60**, 281–298 (1940).
- [92] C. Domb, “On multiple returns in the random-walk problem,” *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* **50**, 586 (1954).
- [93] V. Popov, *Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics* (Reidel, D., Dordrecht, 1983).
- [94] D. S. Petrov, D. M. Gangardt, et G. V. Shlyapnikov, “Low-dimensional trapped gases,” *J. Phys IV* **116**, 3–44 (2004).
- [95] J. Dalibard, *Atomes ultra-froids, notes de cours* (2006). <http://www.phys.ens.fr/~dalibard/>.
- [96] H.-W. Hammer et D. Son, “Universal Properties of Two-Dimensional Boson Droplets,” *Phys. Rev. Lett.* **93**, 250408 (2004).
- [97] M. Gaudin, *La fonction d’onde de Bethe* (Masson, 1983).
- [98] B. Sutherland, *Beautiful Models : 70 Years of Exactly Solvable Quantum Many-Body Problems* (World Scientific, 2004).
- [99] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky, et M. Olshanii, “Relaxation in a completely integrable many-body Quantum system: An Ab initio study of the dynamics of the highly excited states of 1D lattice hard-core bosons,” *Phys. Rev. Lett.* **98**, 050405 (2007).
- [100] V. Yurovsky, A. Ben-Reuven, et M. Olshanii, “One-Dimensional Bose Chemistry: Effects of Nonintegrability,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 163201 (2006).
- [101] V. a. Yurovsky, M. Olshanii, et D. S. Weiss, “Collisions, correlations, and integrability in atom waveguides,” *Adv. At. Opt. Phys.* **55**, 61–138 (2008).
- [102] T. Cheon et T. Shigehara, “Fermion-Boson Duality of One-dimensional Quantum Particles with Generalized Contact Interaction,” *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2536 (1999).
- [103] M. Olshanii et L. Pricoupenko, “Rigorous approach to the problem of ultraviolet divergencies in dilute Bose gases,” *Phys. Rev. Lett.* **88**, 010402 (2001).
- [104] Y. Castin et C. Herzog, “Bose–Einstein condensates in symmetry breaking states,” *Comptes Rendus l’Académie des Sci. - Ser. IV - Phys.* **2**, 419–443 (2001).
- [105] M. T. Batchelor, M. Bortz, X. W. Guan, et N. Oelkers, “Evidence for the super Tonks–Girardeau gas,” *J. Stat. Mech. Theory Exp.* **05**, 10001 (2005).
- [106] E. Tempfli, S. Zöllner, et P. Schmelcher, “Excitations of attractive 1D bosons: binding versus fermionization,” *New J. Phys.* **10**, 103021 (2008).
- [107] V. I. Yukalov et M. D. Girardeau, “Fermi-Bose mapping for one-dimensional Bose gases,” *Laser Phys. Lett.* **2**, 375 (2005).

- [108] M. D. Girardeau et A. Minguzzi, “Soluble models of strongly interacting ultracold gas mixtures in tight waveguides,” *Phys. Rev. Lett.* **99**, 230402 (2007).
- [109] B. Fang, P. Vignolo, C. Miniatura, et A. Minguzzi, “Fermionization of a strongly interacting Bose-Fermi mixture in a one-dimensional harmonic trap,” *Phys. Rev. A* **79**, 023623 (2009).
- [110] P. Vignolo et A. Minguzzi, “Universal Contact for a Tonks-Girardeau Gas at Finite Temperature,” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 020403 (2013).
- [111] M. Olshanii et V. Dunjko, “Short-Distance Correlation Properties of the Lieb-Liniger System and Momentum Distributions of Trapped One-Dimensional Atomic Gases,” *Phys. Rev. Lett.* **91**, 090401 (2003).
- [112] M. D. Girardeau, H. Nguyen, et M. Olshanii, “Effective interactions, Fermi-Bose duality, and ground states of ultracold atomic vapors in tight de Broglie waveguides,” *Opt. Commun.* **243**, 3–22 (2004).
- [113] M. D. Girardeau et M. Olshanii, “Fermi-Bose mapping and N-particle ground state of spin-polarized fermions in tight atom waveguides,” arXiv :cond-mat p. 0309396 (2003).
- [114] B. E. Granger et D. Blume, “Tuning the Interactions of Spin-Polarized Fermions Using Quasi-One-Dimensional Confinement,” *Phys. Rev. Lett.* **92**, 133202 (2004).
- [115] M. D. Girardeau et E. M. Wright, “Static and Dynamic Properties of Trapped Fermionic Tonks-Girardeau Gases,” *Phys. Rev. Lett.* **95**, 010406 (2005).
- [116] M. D. Girardeau et a. Minguzzi, “Bosonization, Pairing, and Superconductivity of the Fermionic Tonks-Girardeau Gas,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 080404 (2006).
- [117] A. Minguzzi et M. D. Girardeau, “Pairing of a harmonically trapped fermionic Tonks-Girardeau gas,” *Phys. Rev. A* **73**, 063614 (2006).
- [118] T. Kinoshita, T. Wenger, et D. S. Weiss, “A quantum Newton’s cradle.” *Nature* **440**, 900–3 (2006).
- [119] G. S. Danilov, “On the three-body problem with short-range forces,” *Sov. Phys. JETP* **13**, 349 (1961).
- [120] L. Pricoupenko, “Crossover in the Efimov spectrum,” *Phys. Rev. A* **82**, 043633 (2010).
- [121] C. Mora, R. Egger, a. O. Gogolin, et a. Komnik, “Atom-Dimer Scattering for Confined Ultracold Fermion Gases,” *Phys. Rev. Lett.* **93**, 170403 (2004).
- [122] C. Mora, R. Egger, et a. O. Gogolin, “Three-body problem for ultracold atoms in quasi-one-dimensional traps,” *Phys. Rev. A* **71**, 052705 (2005).
- [123] Y. Castin, “Simple theoretical tools for low dimension Bose gases,” *J. Phys. IV* **116**, 89–134 (2004).
- [124] G. V. Skorniakov et K. a. Ter-Martirosian, “Three Body Problem for Short Range Forces. I. Scattering of Low Energy Neutrons by Deuterons,” *Sov. Phys. JETP* **4**, 648–661 (1957).
- [125] H. Bethe, “Zur Theorie der Metalle,” *Zeitschrift für Phys.* **71**, 205–226 (1931).

- [126] M. T. Batchelor, “The Bethe ansatz after 75 years,” *Phys. Today* **60**, 36–40 (2007).
- [127] X.-J. Liu, H. Hu, et P. D. Drummond, “Exact few-body results for strongly correlated quantum gases in two dimensions,” *Phys. Rev. B* **82**, 054524 (2010).
- [128] A. Comtet, Y. Georgelin, et S. Ouvry, “Statistical aspects of the anyon model,” *J. Phys. A Math. Gen.* **22**, 3917–3925 (1989).
- [129] J. McCabe et S. Ouvry, “Perturbative three-body spectrum and the third virial coefficient in the anyon model,” *Phys. Lett. B* **260**, 113–119 (1991).
- [130] X.-J. Liu, “Virial expansion for a strongly correlated Fermi system and its application to ultracold atomic Fermi gases,” *Phys. Rep.* **524**, 37–83 (2013).
- [131] V. Ngampruetikorn, M. M. Parish, et J. Levinsen, “High-temperature limit of the resonant Fermi gas,” *Phys. Rev. A* **91**, 013606 (2015).
- [132] T.-L. Ho, “Universal Thermodynamics of Degenerate Quantum Gases in the Unitarity Limit,” *Phys. Rev. Lett.* **92**, 090402 (2004).
- [133] T.-L. Ho et E. J. Mueller, “High temperature expansion applied to fermions near Feshbach resonance,” *Phys. Rev. Lett.* **92**, 160404 (2004).
- [134] K. M. Daily et D. Blume, “Thermodynamics of the two-component Fermi gas with unequal masses at unitarity,” *Phys. Rev. A* **85**, 013609 (2012).
- [135] X.-J. Liu et H. Hu, “Virial expansion for a strongly correlated Fermi gas with imbalanced spin populations,” *Phys. Rev. A* **82**, 043626 (2010).
- [136] X.-J. Liu, H. Hu, et P. D. Drummond, “Three attractively interacting fermions in a harmonic trap: Exact solution, ferromagnetism, and high-temperature thermodynamics,” *Phys. Rev. A* **82**, 023619 (2010).
- [137] K. Huang, *Statistical mechanics* (Wiley, 1987).
- [138] A. Fetter et J. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems* (Dover Book, 2003).
- [139] T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger, J. G. Danzl, C. Chin, B. Engeser, A. D. Lange, K. Pilch, A. Jaakkola, H.-C. Nägerl, et R. Grimm, “Evidence for Efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms.” *Nature* **440**, 315–8 (2006).
- [140] S. Knoop, F. Ferlaino, M. Mark, M. Berninger, H. Schöbel, H.-C. Nägerl, et R. Grimm, “Observation of an Efimov-like trimer resonance in ultracold atom–dimer scattering,” *Nat. Phys.* **5**, 227–230 (2009).
- [141] K. Aikawa, A. Frisch, M. Mark, S. Baier, A. Rietzler, R. Grimm, et F. Ferlaino, “Bose-Einstein Condensation of Erbium,” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 210401 (2012).
- [142] B. Pasquiou, E. Maréchal, L. Vernac, O. Gorceix, et B. Laburthe-Tolra, “Thermodynamics of a Bose-Einstein Condensate with Free Magnetization,” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 045307 (2012).
- [143] A. de Paz, A. Sharma, A. Chotia, E. Maréchal, J. H. Huckans, P. Pedri, L. Santos, O. Gorceix, L. Vernac, et B. Laburthe-Tolra, “Nonequilibrium Quantum Magnetism in a Dipolar Lattice Gas,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 185305 (2013).
- [144] G. Quémener et P. S. Julienne, “Ultracold molecules under control!” *Chem. Rev.* **112**, 4949–5011 (2012).

- [145] P. Giannakeas, V. S. Melezhik, et P. Schmelcher, “Dipolar Confinement-Induced Resonances of Ultracold Gases in Waveguides,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 183201 (2013).
- [146] A. Simoni, S. Srinivasan, J.-M. Launay, K. Jachymski, Z. Idziaszek, et P. S. Julienne, “Polar molecule reactive collisions in quasi-1D systems,” *New J. Phys.* **17**, 013020 (2015).
- [147] S. Moroz, J. P. D’Incao, et D. S. Petrov, “Generalized Efimov effect in one dimension,” arxiv p. 1506.03856 (2015).

Sujet : Quelques problèmes à petit nombre d'atomes froids dans des guides d'onde

Résumé : Ce manuscrit est motivé par la possibilité d'explorer de nombreux régimes quantiques grâce aux atomes froids : l'utilisation de résonances de diffusion rend possible un contrôle très fin des effets des interactions et l'ajout de pièges extérieurs permet de s'approcher de régimes de dimension réduite. Nous étudions ici quelques propriétés d'atomes froids piégés dans des guides d'onde uni- ou bidimensionnels au voisinage de résonances de Feshbach. En jouant sur l'intensité du confinement, on peut étudier la transition entre un système tridimensionnel et un système en dimension réduite. Nous modélisons les interactions par un modèle à deux voies qui inclut le couplage cohérent entre atomes et molécules de Feshbach. Nous mettons en évidence l'existence d'un régime unidimensionnel, que l'on peut décrire par un modèle de contact, et dans lequel la portée effective est un paramètre essentiel. Nous examinons alors le problème à trois corps dans ce régime pour des bosons ainsi que dans le régime équivalent pour des fermions totalement polarisés, en particulier leurs propriétés d'intégrabilité. Enfin, nous étudions le développement du viriel d'un gaz d'atomes froids. Nous démontrons, grâce à une approche diagrammatique, une généralisation de la formule de Beth et Uhlenbeck qui prend en compte à la fois les molécules de Feshbach et l'existence d'un guide d'onde.

Mots clés : Atomes froids, résonance de Feshbach, dimension réduite, problème à trois corps, intégrabilité, développement du viriel.

Subject : Some few-body cold atom problems in waveguides

Abstract : This manuscript is motivated by the possibility of exploring many quantum regimes using cold atoms: interactions can be tuned very precisely by using Feshbach resonances and low-dimensional regimes can be approached with external potentials. Here, we study some properties of cold atoms trapped into uni- or bidimensional waveguides in the vicinity of a Feshbach resonance. The transition from a tridimensional to a low-dimensional system can then be studied by varying the intensity of the confinement. Interactions are described with a two-channel model that includes the coherent coupling between atoms and Feshbach molecules. We highlight a unidimensional regime, that can be described with a contact model and in which the effective range parameter is essential. Thus we investigate the three-body problem in this regime for bosons and also in the equivalent regime for totally polarized fermions, in particular their integrability properties. Finally, we study the virial expansion of a gas of cold atoms. Using a diagrammatic approach, we derive a generalization of the Beth and Uhlenbeck formula, that takes into account both the Feshbach molecules and the existence of a waveguide.

Keywords : Cold atoms, Feshbach resonance, low dimension, three-body problem, integrability, virial expansion.