

PREMIER MINISTRE
COMMISSARIAT A
L'ÉNERGIE ATOMIQUE

**CONTRIBUTION A LA THÉORIE
DE LA
MATIÈRE NUCLÉAIRE A BASSE DENSITÉ**

par

Madan Lal MEHTA

Rapport C.E.A. n° 2086

*

1961

CENTRE D'ÉTUDES
NUCLÉAIRES DE SACLAY
SERVICE DE DOCUMENTATION
Boîte postale n° 2 — Gif-sur-Yvette (S.-et-O.)

MEHTA M.

Rapport C.E.A. n° 2086

CONTRIBUTION A LA THEORIE DE LA MATIERE NUCLEAIRE A BASSE DENSITE

Sommaire :

Une combinaison de la méthode variationnelle utilisant des transformations canoniques spéciales conservant l'impulsion, et de la méthode de resommation infinie des termes dominants à basse densité est utilisée pour étudier l'état fondamental d'un système à N particules en interaction forte.

Sous réserve de l'hypothèse que l'énergie d'excitation E_k est convexe et partout positive, nous avons démontré la régularité de la matrice t obtenue en resommant des échelles montantes une fois effectuée la transformation canonique spéciale qui minimise la valeur moyenne de l'énergie. Quelques exemples particuliers sont étudiés en détail.

1961

132 pages

MEHTA M.

Report C.E.A. n° 2086

A CONTRIBUTION TO THE THEORY OF NUCLEAR MATTER AT LOW DENSITY

Summary :

A combination of the variational method using special momentum conserving canonical transformations and the method of resummation of the infinite series of dominating terms in the low density limit is used to study a strongly interacting N particle system.

Under the hypothesis that the excitation energy E_k is convex and everywhere positive after the special canonical transformation minimising the average value of the energy has been performed, we have shown that the t -matrix obtained by the summation of the ascending ladders is free from all singularities. Some particular examples are studied in detail.

1961

132 pages

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Madan Lal MEHTA

PREMIÈRE THÈSE

Contribution à la Théorie de la matière nucléaire à basse densité

DEUXIÈME THÈSE

Propositions données par la Faculté

Soutenues le

1961 devant la Commission d'examen

M. F. PERRIN

Président

M^{me} P. BENOIST

M. Ph. MEYER

M. C. BLOCH

} Examineurs

Invité

FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

PROFESSEURS

Doyen M. ZAMANSKY

- G. JULIA - T. *Analyse supérieure et Algèbre supérieure.*
DE BROGLIE - T. *Théories physiques.*
PRENANT - T. *Anatomie et Histologie comparées.*
PERES - T. *Mécanique des fluides et applications.*
BOURCART - T. *Géographie physique et Géologie dynamique.*
PLANTEFOL - T. *Botanique.*
GRASSE - T. *Evolution des êtres organisés.*
PREVOST - T. *Chimie organique.*
BOULIGAND - T. *Analyse appliquée à la Géométrie.*
CHAUDRON - T. *Chimie appliquée.*
WYART - T. *Minéralogie et Cristallographie.*
TEISSIER - T. *Zoologie.*
MANGENOT - T. *Biologie Vég. (Orsay).*
AUGER - T. *Physique quantique et Relativité.*
MONNIER - T. *Physiologie des Fonctions.*
PIVETEAU - T. *Paléontologie.*
ROCARD - T. *Physique (E.N.S.).*
CARTAN - T. *Mathématiques (E.N.S.).*
LAFFITTE - T. *Chimie Générale.*
FAVARD - T. *Géométrie supérieure.*
COULOMB - T. *Physique du Globe.*
Mlle COUSIN - T. *Biologie.*
CHRETIEN - T. *Chimie minérale.*
DRACH - T. *Zoologie.*
KASTLER - T. *Physique (E.N.S.).*
EPHRUSSI - T. *Génétique.*
RIVIERE - T. *Géologie (Orsay).*
GAUTHERET - T. *Biologie (P.C.B.).*
R. LUCAS - T. *Recherches Physiques.*
A. THOMAS - T. *Biologie cellulaire.*
ARNULF - T. *Optique appliquée.*
MORAND - T. *Physique Enseignement.*
SOLEILLET - T. *Physique (P.C.B.).*
FORTIER - T. *Mécan. expérimentale des Fluides.*
DANJON - T. *Astronomie.*
PETIT - T. *Biologie maritime.*
QUENEY - T. *Météorologie et dynamique atmosphérique.*
GALLIEN - T. *Embryologie.*
EICHHORN - T. *Biologie Végétale (P.C.B.).*
DE CUGNAC - T. *Biologie Végétale (S.P.C.N.).*
Mlle CAUCHOIS - T. *Chimie Physique.*
THELLIER - T. *Physique du Globe.*
L'HERITIER - T. *Biologie Générale (Orsay).*
GRIVET - T. *Radioélectricité (Orsay).*
PONCIN - T. *Mécanique Générale.*
DUBREIL - T. *Arithmétique et Théorie des Nombres.*
QUELET - T. *Chimie Organique.*
CAGNIARD - T. *Géophysique appliquée.*
CHAMPETIER - T. *Chimie Macromoléculaire.*
CUVILLIER - T. *Micropaléontologie.*
JUNG - T. *Pétrographie.*
TRILLAT - T. *Microscopie et diffraction électronique.*
WIEMANN - T. *Chimie organique et struct.*
JACQUINOT - T. *Spectroscopie (Orsay).*
VASSY - T. *Physique de l'Atmosphère.*
DESTOUCHES - T. *Théories Physiques.*
PRUVOST - T. *Géologie.*
AMIEL - T. *Chimie des Solides.*
HOCART - T. *Minéralogie et Cristallogr.*
J.-P. MATHIEU - T. *Recherches Physiques.*
COUTEAUX - T. *Biol. Animale (P.C.B.).*
MAY - T. *Zoologie (Orsay).*
CHOQUET - T. *Théorie des fonctions et Topologie.*
FELDMANN - T. *Biologie Végétale (P.C.B.).*
GUINIER - T. *Physique des Solides (Orsay).*
JOST - T. *Physiologie comparée.*
FORTET - T. *Calcul des Probabilités.*
SCHWARTZ - T. *Calcul diff. et Intégral.*
CHOUARD - T. *Physiologie Végétale.*
MALAVARD - T. *Aviation (Tech. Aéronaut.).*
BRELOT - T. *Calcul différentiel.*
NORMANT - T. *Synthèse organique générale.*
BENARD - T. *Chimie (E.N.S.C.P.).*
BUVAT - T. *Botanique (E.N.S.).*
DUGUE - T. *Statistiques Mathématiques.*
SOULAIRAC - T. *Psychophysiologie.*
ULRICH - T. *Physiologie Végétale (E.N.S.).*
MARECHAL - T. *Optique théorique et Appl.*
KIRRMANN - T. *Théories Chimiques.*
CHADEFAUD - T. *Botanique.*
Mlle LE BRETON - T. *Physiologie.*
SALEM - T. *Mathématiques générales.*
LELONG - T. *Mathématiques générales.*
DEVILLERS - T. *Anatomie et Histologie comparées.*
EHRESMANN - T. *Topologie Algébrique.*
FRANÇON - T. *Physique (S.P.C.N.).*
GLANGEAUD - T. *Géographie physique et Géologie dynamique.*
GODEMENT - T. *Mathématiques (M.P.C.).*
PISOT - T. *Calcul des Probabilités.*
ROCH - T. *Géologie.*
SCHATZMAN - T. *Astrophysique.*
TERMIER - T. *Paléontologie stratigraphique.*
ZAMANSKY - T. *Mathématiques générales.*
LENNUIER - T. *Physique (P.C.B.).*
RIZET - T. *Génétique (Orsay).*
ROUTHIER - T. *Géologie appliquée.*
Mme TONNELAT - T. *Relativité.*
DIXMIER - T. *Mathématiques (M.P.C.).*
SOUCHAY - T. *Chimie (P.C.B.).*
AIGRAIN - T. *Electrotechnique générale.*
BRUSSET - T. *Chimie minérale.*
M. LEVY - T. *Physique théorique des hautes énergies (Orsay).*
Mme CHAIX - T. *Chimie biologique.*
Mme HURELPY - T. *Biologie Végétale (P.C.B.).*
PIAUX - T. *Chimie (S.P.C.N.).*
BRUN - T. *Mécan. expérimentale des fluides.*
LEDERER - T. *Chimie biologique.*
Mme DUBREIL - T. *Mathématiques (Agreg.).*
Mme LELONG - T. *Mathématiques (E.N.S.).*
MELLAIR - T. *Géologie (S.P.C.N.).*

COTTE - T. *Physique (U.P.C.)*.
 J.E. DUBOIS - T. *Chimie (M.P.C.)*.
 LAMOTTE - T. *Zoologie (E.N.S.)*.
 André MICHEL - T. *Chimie Minérale (Orsay)*.
 OLMER - T. *Energétique générale*.
 ROUAULT - T. *Physique*.
 GAUTHIER - T. *Mécanique appliquée*.
 BARCHEWITZ - T. *Chimie Physique*.
 BROSSEL - T. *Physique atomique*.
 BUSER - *Biologie animale (P.C.B.)*.
 CAMUS - *Biologie végétale (P.C.B.)*.
 CASTAING - T. *Physique (Orsay)*.
 CURIEN - T. *Minéralogie et Cristallogr.*
 MOYSE - T. *Physiologie végét. (Orsay)*.
 PANNETIER - T. *Chimie (Orsay)*.
 POSSOMPES - T. *Biologie Animale (P.C.B.)*.
 PULLMANN - *Chimie théorique*.
 TEILLAC - T. *Physique Nucléaire et Radioactivité (Orsay)*.
 TONNELAT - *Biologie physico-chim.*
 VILLE - T. *Econométrie*.
 WILLEMART - *Chimie (P.C.B.)*.
 DODE - T. *Chimie (Orsay)*.
 FREYMANN - T. *Physique (S.P.C.N.)*.
 GUINOCHET - T. *Biologie Vég. (Orsay)*.
 ROLLET - T. *Chimie (P.C.B.)*.
 Mlle JOSIEN - T. *Chimie (P.C.B.)*.
 CHEVALLEY - T. *Géométrie algébrique et théorie des groupes*.
 ARNOULT - T. *Electronique (Orsay)*.
 CHAPELLE - T. *Physique (Orsay)*.
 DELANCE - T. *Mathématiques (Orsay)*.
 DENY - T. *Mathématiques Générales (Orsay)*.
 GERMAIN - T. *Mécanique théorique des fluides*.
 G. LUCAS - T. *Géologie*.
 ALLARD - T. *Chimie Physique*.
 BERTHELOT - T. *Physique Fondamentale des Hautes Energies (Orsay)*.
 BRICARD - T. *Météorologie*.
 Mme ALBE-FESSARD - *Psychophysiologie*.
 FRIEDEL - *Physique des Solides (Orsay)*.
 M. JULIA - *Chimie Organ. Structurale*.
 LENDER - *Biologie Animale (S.P.C.N.), Orsay*.
 MAGAT - *Physico-chimie des rayonnements*.
 Mlle QUINTIN - T. *Electrochimie*.
 MONOD - T. *Biochimie Cellulaire*.
 BENOIT - T. *Physiol. Anim. (Orsay)*.
 DE POSSEL - T. *Analyse numérique*.
 CHARLOT - T. *Chimie analytique*.
 HAISSINSKY - T. *Radiochimie*.
 LEMEE - T. *Physiol. B.M.P.V. (Orsay)*.
 GUERIN - T. *Chimie (Orsay)*.
 M. CHATELET - *Chimie (P.C.B.)*.
 JEAN - *Physique (Orsay)*.
 MATTLER - T. *Physique (Orsay)*.
 Louis MICHEL - *Physique théor. (Orsay)*.
 RUMPF - *Chimie (P.C.B.)*.
 BERGERARD - *Biol. Anim. (S.P.C.N.) (Orsay)*.
 BERTEIN - *Electronique (Orsay)*.
 BOUSSIÈRES - *Chimie des Radioéléments (Orsay)*.
 Mme COUTURE - *Thermodynamique et Mécanique Physique*.
 ELLENBERGER - *Géologie appliquée*.
 FRANC - *Biol. Animale (P.C.B.)*.
 SCHNELL - *Botanique tropicale (Orsay)*.
 STOLKOWSKI - *Biol., Animale (P.C.B.)*.
 ACHER - *Chimie Biol. (Orsay)*.
 BAUDOIN - *Biologie*.
 BEAUMONT - *Biologie animale*.
 BLAMONT - *Géophysique Ionosphère*.
 BOURREAU - *Biologie Végétale (S.P.C.N.) Orsay*.
 D. CURIE - *Physique (M.G.P.)*.
 DURAND-DELGA - *Géologie*.
 FREON - *Chimie Organique (Orsay)*.
 HELLER - *Physiologie végétale*.
 TORTRAT - *Calcul des Probabilités*.
 CAILLEUX - *Géologie (S.P.C.N.)*.
 MAGNAN - T. *Physique (P.C.B.)*.
 DAUDEL - *Mécanique ondulatoire appliquée à la chimie théorique et à la Physique nucléaire*.
 Mlle FOURCROY - *Biologie Végétale (S.P.C.N.)*.
 BARRAUD - *Physiologie Cellulaire*.
 NOIROT - *Evolution des êtres organisés*.
 Mme FOURES-BRUHAT - T. *Mécan. Analytique et Mécanique céleste*.
 Mlle VEÏL - *Physiologie Générale*.
 LWOFF - T. *Microbiologie*.
 SIESTRUNCK - T. *Mécanique physique et expérimentale*.
 LACOMBE - T. *Métallurgie (Orsay)*.
 BROCHARD - T. *Physique P.C.B. (Orsay)*.
 CABANNES - T. *Mécanique générale*.
 LESIEUR - T. *Mathématiques M.P.C. (Orsay)*.
 MAZET - T. *Mécanique générale (Orsay)*.

Secrétaire général R. POUILLAIN



समर्पण

पिताजी की
जिन्होंने मुझे नई बातें सीखने के लिये
सदा तत्पर रहना सिखाया।

Dédiée à mon Père
qui m'a enseigné à rester toujours
prêt à apprendre des choses nouvelles.

RÉSUMÉ

La méthode de Brueckner repose d'une part sur le développement de Rayleigh-Schrödinger, et d'autre part sur la resommation de la série infinie des termes dominants à la limite des basses densités. La matrice t qui résulte de cette sommation peut avoir des pôles au voisinage de la surface de Fermi. Ceux-ci correspondent aux états liés de paires découverts par Cooper. Ils introduisent des divergences dans les intégrales donnant par exemple l'énergie de l'état fondamental, et empêchent par conséquent de construire une théorie cohérente à la limite des basses densités. Le but de ce travail est l'élimination de ces singularités.

Les essais antérieurs pour éliminer ces singularités en resommant des classes infinies de plus en plus étendues, n'ont pas amélioré la situation.

La possibilité qu'il existe un état lié de nucléons d'impulsion et de spin opposés au voisinage de la surface de Fermi entraîne un étalement important de cette surface. Toute théorie des perturbations qui ne tient pas compte de cet étalement dès le départ est donc douteuse. La méthode variationnelle de Bogoliubov qui consiste à introduire une transformation canonique spéciale conservant l'impulsion s'est révélée très puissante.

Nous allons montrer qu'on peut obtenir une théorie

cohérente et élégante par une combinaison naturelle des deux méthodes ; la transformation de Bogoliubov décrit bien l'étalement de la surface de Fermi, et une sommation partielle à la Brueckner élimine les difficultés dues au caractère singulier de l'interaction. Ainsi pour une interaction entre paires d'impulsion totale nulle, nous avons démontré que la matrice τ , construite en resumant les termes dominants après la transformation canonique ne peut pas avoir de singularité quel que soit le potentiel si les énergies d'excitation de quasi-particules sont toutes positives.

Pour une interaction entre paires d'impulsion totale quelconque, il est nécessaire de reprendre la notion de potentiel self-consistant.

Moyennant l'hypothèse que l'énergie d'excitation des quasi-particules est une fonction convexe de l'impulsion et partout positive, nous avons alors démontré la régularité de la matrice τ correspondante.

Nous traitons en détail deux formes spéciales souvent utilisées : l'interaction séparable et l'interaction doublement séparable ; nous donnons alors la forme explicite de la matrice τ . Nous indiquons enfin les résultats de quelques calculs numériques de la matrice τ après transformation canonique dans le cas d'une interaction séparable.

INTRODUCTION

Depuis longtemps l'étude expérimentale des noyaux atomiques et particulièrement celle des noyaux lourds a montré que, mis à part quelques petites variations dues aux effets de surface et d'énergie coulombienne, les propriétés globales telles que la densité, l'énergie de liaison par particule etc... sont constantes. Ces résultats et d'autres, par exemple le spin ou le moment magnétique de leur état fondamental, peuvent être expliqués par un modèle selon lequel les particules se propagent à l'intérieur de la matière nucléaire presque indépendamment les unes des autres (1).

D'autre part il semble, d'après les expériences de diffusion (2) que l'interaction des nucléons libres soit forte ; une répulsion très forte et pratiquement infinie pour les phénomènes de basse énergie apparaît lorsque la distance entre deux nucléons devient inférieure à 0.4 fermi. Pour les distances un peu plus grandes l'interaction est attractive, et elle diminue régulièrement, tendant vers zéro assez vite avec la distance. Donc à première vue il semble quelque peu paradoxal d'imaginer que les nucléons se comportent comme des particules libres à l'intérieur des systèmes nucléaires alors qu'ils interagissent fortement dans une expérience de diffusion nucléon-nucléon. Le but essentiel

d'une théorie de la matière nucléaire est d'expliquer ce paradoxe.

On pourrait en principe utiliser la théorie des champs mésiques ⁽³⁾ pour expliquer tout à la fois l'interaction forte des nucléons libres ⁽⁴⁾ et les propriétés de noyaux ⁽⁵⁾ au lieu de dériver l'un de l'autre. Mais en raison des difficultés de la théorie des mésons même pour les cas les plus simples, il n'est pas encourageant de l'entreprendre. Les résultats les plus intéressants obtenus ces dernières années ont été déduits de théories représentant l'interaction des particules par des potentiels. Pour expliquer tous les phénomènes il a suffi, jusqu'à présent, d'introduire des interactions de particules deux à deux. Il ne semble pas que les potentiels à trois particules ou plus prévus par les théories mésiques jouent un rôle très important dans les phénomènes nucléaires de basse énergie étudiés jusqu'à présent.

On obtiendrait toutes les propriétés physiques d'un système si l'on pouvait résoudre l'équation de Schrödinger correspondante, ce qu'on ne sait pas faire exactement dès que le nombre de particules dans le système devient supérieur à deux. On ne peut faire alors que des approximations successives qui sont fournies de façon systématique par la théorie des perturbations. Des méthodes variationnelles ont aussi été utilisées avec profit pour obtenir une première approximation de l'énergie du fondamental. Mais ces méthodes ne nous donnent aucun renseignement sur les corrections successives qu'il y a lieu de faire pour améliorer la première approximation.

Euler ⁽⁶⁾ et Huby ⁽⁷⁾ avaient déjà considéré un développement en puissances de l'interaction jusqu'au deuxième ordre pour l'énergie de liaison de la matière nucléaire, mais la nécessité de prendre une force d'échange très grande (80% - 90 %) pour avoir la saturation a malheureusement conduit à écarter ce procédé pendant longtemps. L'introduction d'un coeur dur répulsif ⁽²⁾ a permis de diminuer la partie d'échange mais il a rendu cette théorie inutilisable dans sa forme originale.

L'application des développements perturbatifs à ce genre de problèmes a connu, il y a quelques années, un renouveau d'intérêt lorsque Brueckner ⁽⁸⁾ (dès 1954) a pu l'adapter à une interaction comprenant un coeur dur. Il développe l'énergie du système en puissances non plus d'une interaction v_{12} , mais d'une matrice réaction τ_{12} . Etudiant ainsi la contribution d'une classe de termes de la série des perturbations il a obtenu des résultats quantitatifs pour les propriétés de la matière nucléaire. Il devait cependant se heurter à des difficultés. La théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger qu'il utilisait engendrait apparemment des termes proportionnels non pas seulement au volume, mais à toutes les puissances du volume ; aux ordres accessibles, cependant, les termes en Ω^n ($n > 1$) se compensaient mystérieusement. Goldstone ⁽⁹⁾ puis Hugenholtz ⁽¹⁰⁾ et Bloch ⁽¹¹⁾ ont alors élaboré la méthode générale et démontré qu'il ne restait que des termes proportionnels au volume provenant des diagrammes dits "Vide-vide connexes". Outre cette difficulté maintenant surmontée, d'autres ont surgi

à la suite de la découverte par Cooper ⁽¹²⁾ de la possibilité d'états liés d'un type particulier, dus à un renforcement de l'interaction par un effet de la statistique au voisinage de la surface de Fermi. Cet effet, qui est à l'origine des théories récentes ^(13,14) de la superconductivité, donne lieu à des divergences ⁽¹⁵⁾ que nous allons chercher à éliminer.

En faisant les approximations successives dans le cadre d'une théorie des perturbations, on obtiendra seulement des états qui ne sont pas très différents de l'état de départ et qu'on peut atteindre par continuité en augmentant progressivement l'interaction. Si l'on part de l'état normal non perturbé d'un système où les N particules occupent les niveaux les plus bas jusqu'à une certaine énergie dite "énergie de Fermi", les développements perturbatifs ne permettront d'atteindre que des états pouvant être décrits par une superposition d'états non perturbés où ne sont excitées qu'un nombre de particules très inférieur à N . Mais un état où une fraction macroscopique des particules forme des systèmes liés ne peut pas être atteint par ces méthodes. Après la découverte de Cooper ⁽¹²⁾, Bardeen-Cooper et Schrieffer ⁽¹³⁾ ont construit une fonction d'onde où les nucléons voisins de la surface de Fermi se groupent par paires d'impulsion et de spin total nul pour former des états liés. Cette fonction d'onde, qu'on appellera "le fondamental de B.C.S.", a une énergie moyenne plus basse que l'énergie de l'état normal atteint par perturbations à partir de l'état normal non-perturbé. L'énergie de liaison des nucléons libres disparaît au-dessous d'une valeur finie de l'interaction (le deutéron n'existerait pas si l'interaction proton-neutron était un peu plus faible qu'en réalité). Par contre, la différence entre les énergies de liaison du fondamental de B.C.S. et

l'état normal non-perturbé tend vers zéro avec l'interaction, mais elle n'est jamais nulle. L'existence de cet état de B.C.S. où existent de fortes corrélations, même à la limite des interactions faibles et des faibles densités, empêche de développer une théorie cohérente des perturbations à partir de l'état normal non-perturbé.

Dans les théories récentes (13,14) de la superconductivité on prend comme état non-perturbé l'état lié de B.C.S. décrit plus haut. Cet état est séparé des états excités par un gap qui permet d'expliquer le phénomène de la superconductivité.

Une méthode (14) équivalente mais mathématiquement plus efficace, due à Bogoliubov, consiste à effectuer une transformation canonique linéaire conservant l'impulsion sur les états à une particule, c'est-à-dire à faire un mélange linéaire des états de particules et de trous et à déterminer les paramètres de ce mélange par la condition que la valeur moyenne de l'énergie dans le vide des nouvelles excitations soit stationnaire.

Dans le cas de la matière nucléaire il y a aussi des états liés analogues à celui de Cooper pour les électrons ainsi que l'existence (15) d'un pôle de la matrice réaction de Brueckner le révèle. Il est donc naturel dès le départ d'en tenir compte explicitement par une transformation canonique. La plus simple à utiliser est la transformation linéaire de Bogoliubov qui a pour effet d'étaler la surface de Fermi et donne une bonne fonction d'onde de départ. Mais les interactions nucléaires étant très fortes à courte distance, cela ne suffit pas, car les termes de la série des perturbations

qu'on obtient en partant de cette fonction d'onde seront tous très grands. Cependant, on peut employer le raisonnement de Brueckner que les nucléons interagissent plusieurs fois avant de se séparer. Cet argument physique suggère qu'il faut regrouper les termes ayant le même comportement par rapport à la densité quand celle-ci devient très faible, ce qui permettra de former une nouvelle matrice réaction

Les deux méthodes ci-dessus se complètent d'une façon naturelle ; les ennuis dus à l'existence d'états liés du type de Cooper sont évités en partant de l'état de B.C.S. et ceux dus aux interactions fortes en remplaçant l'interaction ν par une matrice réaction τ à la Brueckner. On peut donc s'attendre à obtenir de cette façon une théorie cohérente de la matière nucléaire dans la limite des basses densités, quelles que soient les interactions.

Dans le chapitre I, nous exposons rapidement la théorie des perturbations de Goldstone ⁽⁹⁾, Hugenholtz ⁽¹⁰⁾, Bloch ⁽¹¹⁾ et la représentation des divers termes par les diagrammes. On rappelle un argument de Hugenholtz ⁽¹⁶⁾ permettant de classer les termes suivant leur comportement par rapport à la densité quand celle-ci devient faible ; l'on donne les arguments qualitatifs en faveur de la définition de la matrice τ de Brueckner. Nous donnons ensuite la transformation de l'équation de Brueckner en une équation intégrale ⁽¹⁷⁾ qui est mieux adaptée aux interactions singulières. Quelques autres méthodes pour traiter les interactions singulières sont rapidement passées en revue. Nous avons insisté sur l'importance de la possibilité d'avoir un état lié de B.C.S. et les modifications de la surface de Fermi qui en résultent. L'insuffisance

de la méthode variationnelle basée sur ces transformations et la nécessité d'introduire les potentiels self-consistants pour traiter les interactions singulières sont exposées à la fin du chapitre I.

Etant donné qu'une sommation partielle des termes contenant la diffusion particule-particule a permis à Brueckner de remplacer les interactions singulières par des amplitudes finies, on a pensé tout d'abord qu'une sommation plus complète ferait disparaître aussi les singularités qui restaient dans cette théorie. Les essais antérieurs de ce genre sont discutés brièvement au chapitre II. L'introduction des diffusions trou-trou en plus des diffusions particule-particule dans la définition de la matrice t rétablit la symétrie entre états de particule et de trou. Malheureusement, au lieu de faire disparaître la singularité, ceci a pour effet de faire apparaître deux singularités de même type l'une au-dessous et l'autre au-dessus de la surface de Fermi, symétriquement par rapport à celle-ci. La nouvelle singularité correspond à un état lié de deux trous analogue à l'état lié de Cooper pour deux particules. Des singularités plus graves encore apparaissent dans la resommation plus vaste des diagrammes dits "en échelle généralisées". La méthode de resommation de diagrammes généralisant les diagrammes en échelle semble donc aller à l'encontre du but recherché.

Dans le chapitre III, nous examinons en détail la méthode variationnelle utilisant la transformation canonique linéaire spéciale qui conserve les impulsions. La théorie des perturbations est reformulée pour tenir compte des "contractions anormales" qui deviennent maintenant possibles. L'hamiltonien

considéré ne contient que les interactions entre paires d'impulsion totale nulle. On démontre que parmi les transformations canoniques qui rendent la valeur moyenne $\langle H \rangle$ stationnaire, il en existe toujours au moins une pour laquelle $\langle H \rangle$ atteint son minimum absolu unique. Les énergies E_k d'excitation des quasi-particules sont alors aussi uniques. Une fois cette transformation effectuée, on peut construire une matrice t non-singulière en resommant, dans la série des perturbations, les termes ayant le même comportement par rapport à la densité quand celle-ci devient faible, pourvu que les énergies E_k soient toutes positives.

Mais ces énergies d'excitation E_k ne sont pas nécessairement toujours positives. Quelques-unes d'entre elles sont négatives, si la transformation canonique linéaire qui rend $\langle H \rangle$ minimum ne conserve pas d'impulsion.

D'autre part si l'hamiltonien contient une interaction singulière, disons un coeur dur, la valeur moyenne $\langle H \rangle$ est infinie et ceci oblige à reprendre la définition des potentiels self-consistants (Chapitre IV). Les champs w_k et W_k caractérisant ces potentiels sont déterminés de façon à tenir compte des termes de la série des perturbations qui deviennent dominants à la limite des basses densités. Ainsi pour le champ

W_k source des paires, on obtient l'équation de compensation des "diagrammes dangereux" tandis que pour le champ normal

w_k on obtient une équation analogue à celle de Brueckner. La première équation introduit une corrélation intrinsèque entre fermions d'impulsion et de spin opposés et fait apparaître quelque chose comme un gap dans le spectre des quasi-particules, tandis que la deuxième équation renormalise la singularité de l'interaction.

Ces deux effets importants étant pris en considération, nous espérons obtenir une théorie cohérente de l'état fondamental. Cet espoir est partiellement rempli. Par exemple, pour une interaction doublement séparable, dont une partie est attractive et l'autre fortement répulsive, la matrice t de Brueckner a un pôle dès que la partie attractive dépasse un certain seuil. Mais dans ce cas, comme nous le verrons (chapitre IV, Section 2.2), la transformation canonique qui rend $\langle H \rangle$ minimum est non-triviale et la champ source des paires W_k différent de zéro. Une fois cette transformation effectuée, on peut construire une matrice t non-singulière, groupant tous les termes de même comportement à très basse densité. En particulier, la contribution des termes dominants à basse densité est obtenue par un calcul du premier ordre par rapport à cette matrice t .

Pour une interaction générale on peut démontrer la régularité de la matrice t obtenue en resumant les termes dominants à basse densité, pourvu que les hypothèses suivantes soient vérifiées :

1°.- L'énergie d'excitation E_k d'une quasi-particule considérée comme une fonction de l'impulsion continue k est convexe ; c'est-à-dire que

$$E_{\frac{1}{2}K+k} + E_{\frac{1}{2}K-k} \geq 2E_k$$

quelle que soit l'impulsion totale K .

2°.- L'énergie E_k est partout positive.

La première hypothèse est vérifiée dans tous les cas étudiés en détail jusqu'à présent. Les particules libres et les excitations élémentaires dans les théories récentes de la superconductivité en sont de bons exemples.

Les énergies E_k sont certainement positives loin de la surface de Fermi. On serait sûr que les E_k sont tous positifs si on pouvait rechercher le minimum de l'énergie moyenne $\langle H \rangle$ du système dans l'ensemble des fonctions d'essai obtenues en effectuant les transformations canoniques linéaires les plus générales ⁽¹⁹⁾. Si le minimum de $\langle H \rangle$ est alors atteint pour une transformation qui conserve l'impulsion, et aucun fait jusqu'à présent n'indique que ce ne soit pas le cas pour les interactions réelles dans la matière nucléaire, alors les énergies E_k obtenues dans la théorie discutée ici seront bien toutes positives. Dans le cas contraire, on ne pourrait obtenir des énergies E_k toutes positives qu'en utilisant la transformation canonique générale qui rend effectivement $\langle H \rangle$ minimum.

Au chapitre V, nous indiquerons les résultats de quelques calculs numériques indiquant les modifications de la matrice t introduites par la transformation canonique.

CHAPITRE I
 LES MÉTHODES GÉNÉRALES
 DE TRAITEMENT DES INTERACTIONS SINGULIÈRES

1.- La théorie des perturbations.*

Soit un système dynamique de N fermions dont l'hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H} = \sum_1^N p_i^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_{ij} \quad (1.1)$$

où p_i^2 est l'énergie cinétique de la particule i et V_{ij} l'interaction entre les particules i et j . Nous posons :

$\hbar = 2 \cdot M = 1$, M étant la masse d'un fermion. On impose au système d'être enfermé dans une grande boîte cubique avec des conditions aux limites que nous choisirons périodiques, pour des raisons de commodité.

Le système de base est constitué d'ondes planes

* Ici, nous nous inspirons d'un cours sur "l'état fondamental d'un système de fermions" fait par Monsieur C. BLOCH (Saclay 1960).

telles que :

$$\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad ; \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{L} \vec{n}, \quad \vec{n} = (n_x, n_y, n_z),$$

$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; $\Omega = L^3$ = le volume de la boîte.

On les désignera par $|\vec{k}\rangle$. Ecrivons \mathcal{H} dans le formalisme de la seconde quantification (20)

$$\mathcal{H} = \sum \vec{k}^2 a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum (rs|V|mn) a_r^+ a_s^+ a_n a_m \quad (1.2)$$

où les $a_{\vec{k}}^+$ ou $a_{\vec{k}}$ sont les opérateurs de création ou d'annihilation d'un fermion dans l'état $|\vec{k}\rangle$ qui vérifient les relations usuelles d'anticommutation :

$$[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}]_+ = a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'} + a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = 0,$$

$$[a_{\vec{k}}^+, a_{\vec{k}'}^+]_+ = a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}'}^+ + a_{\vec{k}'}^+ a_{\vec{k}}^+ = 0 \quad (1.3)$$

et

$$[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^+]_+ = a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}^+ + a_{\vec{k}'}^+ a_{\vec{k}} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}.$$

L'élément de matrice de l'interaction est donné par

$$\langle rs|V|mn\rangle = \frac{1}{2\Omega^2} \int e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1 + i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_2} V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}_1 + i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_2} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \text{le terme (1.4) d'échange}$$

On devrait dans tout ceci tenir compte des autres nombres quantiques, par exemple le spin. Les fonctions de base seraient alors

$$\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \chi_i$$

où χ_i dépend de ces autres nombres quantiques. Toutefois cela ne ferait que compliquer l'écriture sans rien ajouter à la compréhension. On peut donc, dans les raisonnements généraux, se contenter de "fermions sans spin" en rétablissant naturellement le formalisme complet pour établir les résultats finaux.

Si l'interaction ne dépend que des coordonnées relatives

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

ce qui est le cas usuel, on a conservation des impulsions :

$$\langle rs|V|mn\rangle = \delta(\vec{k}_r + \vec{k}_s, \vec{k}_m + \vec{k}_n) V_{rs, mn} .$$

D'autre part, d'après la définition même, on a

$$-(rs|V|mn) = (sr|V|mn) = -(sr|V|nm) = (-s,-r|V|-m,-n) \quad (1.5)$$

la dernière égalité découle de l'invariance de V par renversement du temps.

Toute théorie des perturbations ⁽²¹⁾ repose sur une séparation de l'hamiltonien en deux parties H_0 et H_1 , d'une façon telle que l'on sache calculer exactement les valeurs propres et les fonctions propres de H_0 et que l'effet de H_1 , dit "perturbation" soit suffisamment "petit" dans les conditions données.

Une fois cette séparation faite, on diagonalise H_0 . On utilise les fonctions propres de H_0 comme base, et on exprime H_1 en termes des opérateurs de création et d'annihilation appartenant à cette base. En l'absence de la perturbation H_1 , tous les états au-dessous d'une certaine énergie ϵ_F , dite l'énergie (ou le niveau) de Fermi, sont occupés par des fermions et tous les états au-dessus de cette énergie sont vides.

On peut considérer comme "vide" l'état du système où toutes les particules occupent tous les états individuels jusqu'au niveau de Fermi, aucune ne se trouvant au-dessus. Si une particule a une énergie supérieure à celle de Fermi, on l'appelle une "particule", et s'il manque une vraie particule pour que la mer de Fermi soit pleine, on dit qu'on a un "trou". Quand on introduit la perturbation H_1 , les vraies particules

effectuent des transitions vers des états d'énergie plus grande que ξ_F , ce que l'on exprime en disant que des "particules" et des "trous" sont "brés". Ainsi on peut adopter le langage et toutes les méthodes de la théorie des champs. Goldstone ⁽⁹⁾, puis Hugenholtz ⁽¹⁰⁾ et Bloch ⁽¹¹⁾ ont ainsi donné une théorie cohérente des perturbations que nous ne répéterons pas ici. Essentiellement ils développent l'effet de H_1 sur les grandeurs physiques du système en puissances de H_1 et représentent chaque terme de cette série par un diagramme de Feynman ⁽²²⁾.

On tracera les diagrammes à la manière de Goldstone ⁽⁹⁾ et Bloch ⁽¹¹⁾. Les divers états sont représentés par des lignes continues verticales ; les "particules" par des lignes montantes et les "trous" par des lignes descendantes. L'interaction V est représentée par des lignes pointillées horizontales.

Comme dans la théorie des champs on peut d'abord tracer les divers diagrammes et on obtient leur contribution d'après des règles bien définies. Par exemple, la contribution au développement de

$$e^{\beta H_0} e^{-\beta(H_0+H_1)} = \sum_{p=0}^{\infty} (-)^p \int_{\beta \geq \beta_1 \geq \beta_2 \dots \geq \beta_p \geq 0} d\beta_1 \dots d\beta_p H_1(\beta_1) H_1(\beta_2) \dots H_1(\beta_p) \quad (1.6)$$

avec

$$H_1(\beta) = e^{\beta H_0} H_1 e^{-\beta H_0} \quad (1.7)$$

associée à chaque diagramme s'obtient en formant le produit de plusieurs facteurs ^(9,11):

1)- à chaque interaction est associé un élément de la matrice de perturbation H_1 et un facteur exponentiel $\exp.(\beta_i \Delta E_i)$, où β_i est l'instant auquel se produit l'interaction et ΔE_i l'énergie d'excitation à cet instant, c'est-à-dire la différence entre les énergies du système après et avant l'instant β_i .

2)- chaque terme est affecté du signe $(-)^{h+l}$ où h est le nombre de lignes intérieures descendantes et l le nombre de boucles fermées.

On n'oubliera pas non plus le signe $(-)^p$ qui figure devant chaque terme du développement (1.6).

Il faut enfin effectuer l'intégration ordonnée des temps β_i d'interaction dans l'intervalle $0, \beta$ et la sommation sur l'ensemble permis des valeurs des états associés à chacune des lignes du diagramme.

A titre d'exemple, la contribution du diagramme de la figure 1.1 est donnée par

$$a_m a_n^+ \sum (n, k_4 | H_1 | k_2, k_5) (k_2, k_3 | H_1 | k_1, k_4) (k_1, k_5 | H_1 | m, k_3) \times$$

$$\int \frac{e^{-\beta_1 (\varepsilon_m + \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_3} + \varepsilon_{k_5}) + \beta_2 (-\varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_3} + \varepsilon_{k_2} - \varepsilon_{k_4})}}{e}$$

$$\beta \geq \beta_1 \geq \beta_2 \geq \beta_3 \geq 0$$

$$\cdot e^{\beta_3 (\varepsilon_{k_4} - \varepsilon_{k_2} - \varepsilon_{k_5} + \varepsilon_n)} d\beta_1 d\beta_2 d\beta_3 ,$$

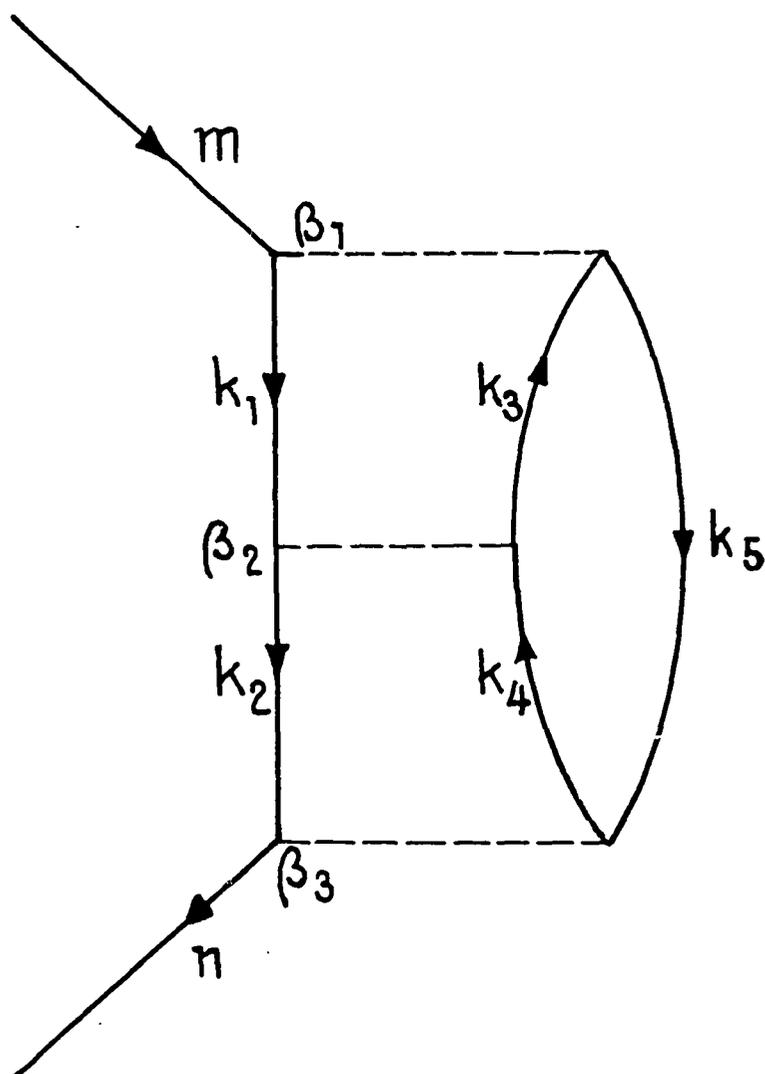


Fig. : 1.1

Un diagramme contribuant au propagateur à une particule dans la théorie de Goldstone.

où ϵ_k est l'énergie d'une particule dans l'état $|k\rangle$ et $-\epsilon_k$ est l'énergie d'un trou dans l'état $|k\rangle$. La sommation sur les indices k_3 et k_4 est effectuée en dehors de la mer de Fermi et la sommation sur les indices k_1 , k_2 et k_5 à l'intérieur.

La différence entre l'énergie de l'état fondamental vrai et celle de l'état fondamental non-perturbé est donnée par l'expression suivante (9,10,11) :

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &= -\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \langle 0 | e^{\beta H_0} e^{-\beta(H_0+H_1)} | 0 \rangle_c \\ &= \langle 0 | H_1 + H_1 \frac{1}{E_0 - H_0} H_1 + H_1 \frac{1}{E_0 - H_0} H_1 \frac{1}{E_0 - H_0} H_1 + \dots | 0 \rangle_c \end{aligned} \quad (1.8)$$

où $|0\rangle$ désigne "le vide" c'est-à-dire l'état le plus bas de H_0 , E_0 son énergie et l'indice c indique que seuls les diagrammes "vide-vide connexes" doivent être pris en considération.

2.- Les termes dominants à basse densité.

Les diagrammes qui interviennent dans la théorie comprennent deux types de lignes, les lignes montantes et les lignes descendantes représentant respectivement la propagation d'une particule et d'un trou. Dans le calcul de la contribution d'un diagramme particulier, les impulsions des lignes montantes sont sommées à l'extérieur et celles des trous à l'intérieur de la mer de Fermi.

D'autre part, le principe de Pauli relie le niveau de Fermi à la densité. En mettant une particule dans chaque état individuel au-dessous de ce niveau, on voit que le volume de la mer de Fermi est proportionnel à la densité spatiale des fermions* :

$$\frac{N}{\Omega} = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{4\pi}{3} k_F^3 \right)$$

Donc à basse densité, lorsque l'impulsion de Fermi est très petite, les termes dominants de la série des perturbations sont ceux qui proviennent des diagrammes comprenant un nombre minimum de trous. Ces diagrammes sont des échelles montantes où deux paires particule-trou sont créées, les trous se propageant librement tandis que les particules interagissent plusieurs fois avant d'être annihilées avec leur propres trous (figure 1.2).

A basse densité les collisions des nucléons sont relativement rares. Mais quand deux nucléons se rencontrent, leur interaction est forte et avant qu'ils ne se séparent, ils ont le temps d'échanger un nombre considérable de mésons. Autrement dit, les nucléons interagissent un grand nombre de fois pendant une collision et avant que l'un des deux rencontre

* Pour les fermions réels ayant un spin 1/2 et un isospin 1/2, le facteur de proportionnalité $\frac{1}{(2\pi)^3}$ est remplacé par $4(2\pi)^{-3}$.

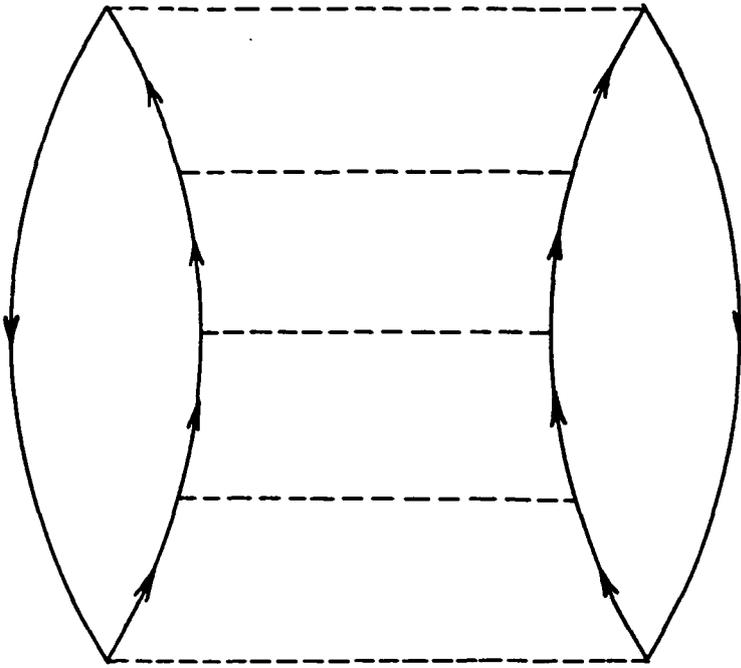


Fig. 1-2

Un diagramme contribuant à l'énergie de liaison dans l'approximation des échelles montantes.

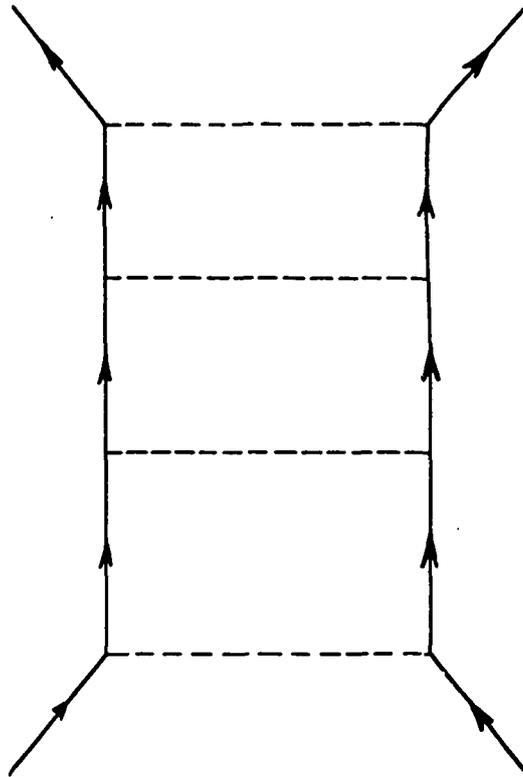


Fig. 1-3

L'échelle montante de Brueckner.

un troisième nucléon. D'autre part, le principe d'exclusion joue un rôle très important ^(23,24,25). L'interaction entre deux nucléons est considérablement modifiée par la simple présence des autres nucléons, car les deux nucléons qui interagissent ne peuvent pas être diffusés dans les états déjà occupés par les autres.

Cette diminution des états intermédiaires possibles dans une diffusion produit un affaiblissement considérable de l'interaction de deux nucléons dans la matière nucléaire, qui facilite beaucoup la convergence des développements.

En suivant ces idées physiques, le programme de Brueckner et de ses collaborateurs ⁽⁸⁾ était alors de remplacer une interaction particule-particule par l'échelle montante (figure 1.3) dans tous les diagrammes, et de faire apparaître ainsi leur interaction effective. Dans le développement perturbatif en fonction de cette interaction effective ou amplitude de diffusion, les seuls diagrammes qui interviennent sont ceux qui ne contiennent plus d'échelles montantes (celles-ci étant déjà comptées dans les amplitudes de diffusion), et où ces amplitudes de diffusion remplacent partout les éléments de matrice du potentiel. Cette transformation consiste en un réarrangement de la série des perturbations et en une sommation partielle des termes ayant le même comportement à la limite des faibles densités. Le diagramme d'ordre un par rapport à la matrice t donne le terme le plus important, les diagrammes d'ordre deux, trois, etc... donnent des termes de moins en moins importants. Comme les rencontres simultanées de trois, quatre, ... nucléons ont une fréquence décroissante, leurs effets sur l'énergie de liaison du système doit être de moins

en moins importants, et on s'attend à une convergence rapide de la série correspondante.

Pour faire une analyse plus détaillée, divers auteurs ont considéré un développement perturbatif plus simple. Levinger et al.⁽²⁶⁾ ont étudié la validité de la théorie des perturbations appliquée à la matière nucléaire à la densité observée. Ils considèrent d'abord une interaction tout à fait régulière et suivant Biedenharn et al.⁽²⁷⁾ ils développent l'énergie de liaison en puissances de l'interaction. Ce calcul est, en principe, identique à celui d'Euler⁽⁶⁾ sauf pour un terme tensoriel introduit dans l'interaction et les valeurs plus récentes adoptées pour les paramètres. Ils trouvent que la contribution à l'énergie au deuxième ordre est d'environ 10 MeV par particule (la contribution du premier ordre étant d'environ 60 MeV) et devient encore plus grande si l'on emploie une interaction dont la partie tensorielle est plus grande. Dans la suite de leur travail, Levinger et al. considèrent les interactions singulières : un coeur dur, ou bien un coeur dur plus une attraction régulière ν à longue portée. Le coeur dur de rayon a est remplacé par une amplitude de diffusion des particules libres et l'énergie de liaison est développée simultanément en puissances de $(k_F a)$ et de ν . On obtient au deuxième ordre deux termes de signe opposé ; l'un provient du coeur dur et l'autre de l'attraction régulière ν . Leurs contributions à l'énergie par particule sont de l'ordre de 20 MeV en valeur absolue pour chacune des trois formes exponentielles, de Yukawa et Guassienne de l'interaction. Leurs signes étant opposés, la contribution totale n'est que de quelques MeV.

Le résultat final au deuxième ordre étant la différence de deux termes grands, la convergence du calcul ne paraît pas très satisfaisante.

3.- L'équation de Bethe-Goldstone. (17)

En fait, la méthode de Brueckner consiste à remplacer un potentiel par une amplitude de diffusion (ou une matrice réaction) de deux particules, qui vérifie l'équation intégrale :

$$t = H_1 + H_1 \frac{Q}{E_0 - H_0} t \quad (1.9)$$

où Q est l'opérateur de projection en dehors de la mer de Fermi. Si l'interaction est d'un type conventionnel, c'est-à-dire partout attractive et d'intensité modérée, cette équation peut être résolue par itération et la solution est très proche de l'approximation de Born (24). Pour de telles interactions on peut obtenir des résultats satisfaisants en employant la théorie des perturbations ordinaires jusqu'au deuxième (ou peut-être jusqu'au troisième) ordre. Le calcul de Swiatecki (28) fournit un tel exemple. Mais pour des interactions singulières, dont le traitement était l'objet essentiel des travaux de Brueckner et al. (8), le fait d'introduire une matrice réaction est très important. Dans ce cas il est commode de transformer l'équation intégrale (1.9) de Brueckner en une équation intégral-différentielle obtenue pour la première fois par Bethe et Goldstone (17).

Ils définissent une fonction d'onde spatiale par sa transformée de Fourier de telle sorte qu'elle s'annule dans la région où le potentiel est singulier et que le produit du potentiel et de cette fonction d'onde reste fini. Cette équation s'écrit :

$$(H_0 + QH_1) \psi = E\psi \quad (1.10)$$

où H_0 est l'hamiltonien non-perturbé, H_1 l'interaction, ψ la fonction d'onde à deux particules et Q l'opérateur de projection à l'extérieur de la mer de Fermi.

L'équation (1.10) ressemble à celle de Schrödinger, cependant la présence de Q ne permet pas la séparation habituelle du problème à deux corps, en un mouvement relatif et un mouvement du centre de masse.

4.- La méthode des pseudo-potentiels.

Il existe une autre méthode pour traiter les potentiels singuliers. L'idée générale est de remplacer l'interaction à deux particules par une condition aux limites convenable imposée à la fonction d'onde ⁽²⁹⁾. A son tour cette condition aux limites peut être remplacée par un potentiel fictif à l'intérieur de la zone singulière suivant Fermi ⁽³⁰⁾, Breit ⁽³¹⁾ et Blatt et Weisskopf ⁽³²⁾. Ces auteurs s'étaient limités aux problèmes de diffusion à l'approximation de basse énergie dans l'état S . Huang, Lee et Yang ⁽³³⁾ ont étendu cette méthode aux ondes de

moment cinétique quelconque. Ils l'ont appliquée à un système de N sphères dures (fermions ou bosons) pour calculer les valeurs propres et les fonctions propres au moyen de développements dont chaque terme est représenté par une classe de diagrammes.

Par exemple, leur calcul de l'énergie par particule pour un système de N fermions donne

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} k_F^2 + 2\pi a \frac{N}{\Omega} \left\{ 1 + 6(11 - 2 \ln 2)(k_F a)(35\pi)^{-1} \right\} + \dots$$

où a désigne le rayon des sphères dures, k_F l'impulsion de Fermi et Ω le volume de la boîte.

La nature de la convergence de ces développements n'est pas connue ⁽³⁴⁾. On peut espérer ⁽³⁵⁾ que ce sont des développements asymptotiques valables à la limite des faibles densités, mais ceci n'a pas été prouvé rigoureusement. Si en plus du coeur dur le potentiel possède une partie attractive, même faible, le calcul devient considérablement plus difficile, et seuls des résultats qualitatifs ont pu être obtenus ⁽³⁶⁾.

5.- Les développements en fonction d'intégrales de "Cluster".

Jastrow ⁽³⁷⁾ a proposé une méthode variationnelle pour traiter en particulier les interactions fortes à courte portée. Il prend comme fonction d'essai

$$\Psi = \phi \prod_{1 \leq i < j \leq N} b(\vec{r}_{ij})$$

où ϕ est une fonction convenablement symétrisée (symétrique pour des bosons et antisymétrique pour des fermions). Le facteur $f(\vec{r}_{ij})$ décrit les corrélations à courte portée requises par l'interaction et il tend vers l'unité pour des grandes distances.

La valeur moyenne de l'hamiltonien

$$\bar{H} = \frac{\int \phi^* \prod f^*(\vec{r}_{ij}) H \phi \prod f(\vec{r}_{ij})}{\int |\phi|^2 \prod |f(\vec{r}_{ij})|^2}$$

est ensuite développée en intégrales de "cluster" en posant

$$|f(\vec{r}_{ij})|^2 = 1 + h(r_{ij})$$

comme dans la théorie classique des gaz imparfaits (38).

Jastrow a appliqué cette méthode avec succès à un gaz de sphères dures (bosons ou fermions) et a obtenu un développement de l'énergie de liaison du fondamental en fonction de la densité N/Ω . Il a utilisé plusieurs formes pour la fonction d'essai f et a trouvé que la forme

$$f(\vec{r}) = 0, \quad |\vec{r}| = r \leq a;$$

$$f(\vec{r}) = 1 - \frac{a}{r} e^{-\beta(r-a)}, \quad r > a$$

est meilleure que la forme exponentielle ou gaussienne. Les premiers termes de son développement sont en puissances de N/Ω et de $(N/\Omega)^{2/3}$.

Ces résultats ont été obtenus par un calcul numérique, le calcul analytique étant très difficile, même pour des sphères dures, contrairement à la méthode des collisions binaires de Huang, Lee et Yang ⁽³³⁾. Pour les potentiels attractifs à longue portée, on peut faire la même remarque que précédemment, à savoir que le calcul devient considérablement plus difficile et l'on ne connaît que des résultats qualitatifs.

6.- Une méthode d'élimination du potentiel singulier.

Villars ⁽³⁹⁾ introduit une transformation canonique de la forme

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= e^{-iS} \mathcal{H} e^{iS} \\ &= \mathcal{H} + i [\mathcal{H}, S] + \frac{i^2}{2!} [[\mathcal{H}, S], S] + \dots\end{aligned}$$

et démontre formellement qu'on peut toujours, pour chaque hamiltonien \mathcal{H} comprenant même des interactions singulières, trouver un opérateur S tel que \tilde{H} ne contienne plus de parties singulières à deux corps ; et que par conséquent la méthode de Hartree-Fock devienne applicable. Bien entendu, \tilde{H} contiendra des forces à plusieurs corps contrairement à \mathcal{H} . Le spectre de \mathcal{H} étant le même que celui de \tilde{H} , une

première approximation consiste à ne conserver que les termes à un et à deux corps de \tilde{H} et à considérer les autres termes comme une perturbation.

7.- Les états liés à deux fermions d'impulsions opposées.

Cooper ⁽¹²⁾ a jeté un doute sur la validité de la théorie des perturbations pour décrire l'état fondamental d'un système de fermions en interaction attractive, aussi faible soit-elle, en construisant un état formé de paires d'impulsion (et éventuellement de spin) totale nulle, dont l'énergie est inférieure à celle de l'état normal où les fermions occupent tous les états jusqu'au niveau de Fermi. Un tel état lié d'une paire de nucléons d'impulsion (et de spin) total nul, qu'on appellera une "paire de Cooper", existe toujours, même pour des attractions arbitrairement petites. Tous les nucléons se trouvant au voisinage du niveau de Fermi se groupent dans des paires de Cooper et la surface de Fermi est donc modifiée toujours d'une façon importante. De nombreux auteurs ⁽¹⁵⁾ ont remarqué que l'approximation de Brueckner présentait une singularité pour des impulsions se trouvant légèrement au-dessous de la surface de Fermi ; indiquant lui aussi une forte modification du spectre à une particule au voisinage de la surface de Fermi, qu'il faut prendre en considération dès le départ.

On trouve une situation semblable dans le problème des électrons dans les métaux. Les paires de Cooper des électrons modifient d'une façon considérable la distribution des états à une particule dans le voisinage du niveau de Fermi.

Ils introduisent un gap dans le spectre du système dans ce voisinage, tandis que loin de la surface de Fermi le spectre n'est pas sensiblement changé. Pour tenir compte de cet effet, on effectue alors la transformation canonique ⁽¹⁴⁾

$$a_k = u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^+ \quad (1.11)$$

et l'on détermine les paramètres u_k, v_k par la méthode variationnelle où la fonction d'onde d'essai est le vide des opérateurs α . Cette transformation se réduit presque à la transformation unitaire loin du niveau de Fermi, mais dans son voisinage et là seulement elle est importante. La surface de Fermi cesse d'être une séparation brutale entre les états vides et les états occupés, la transition se faisant progressivement. Bogoliubov ⁽⁴⁰⁾ a montré que dans le cas d'une interaction séparable, cette méthode variationnelle donne pour l'énergie du fondamental une expression asymptotiquement exacte à la limite d'un très grand volume.

Ces transformations décrivent de manière très satisfaisante la modification importante de la surface de Fermi due aux paires de Cooper. Malheureusement si l'interaction a un coeur dur, la valeur moyenne $\langle H \rangle$ dans le vide des quasi-particules α est divergente, et ces transformations ne peuvent plus être utilisées directement. Dans le cas des interactions singulières, il est indispensable d'utiliser l'une des méthodes décrites plus haut, une sommation partielle à la Brueckner par exemple.

En résumé, le problème de l'état fondamental dans le cas des interactions fortes est donc dominé par les deux faits suivants :

- 1)- il y a formation d'états liés de paires de particules près du niveau de Fermi, ce qui modifie la surface de Fermi ;
- 2)- l'interaction nucléaire est très forte.

Ces deux effets sont bien décrits, le premier par la transformation canonique de Bogoliubov, le second par la sommation des échelles à la Brueckner. Comme la transformation de Bogoliubov n'agit que dans le voisinage de la surface de Fermi, où la méthode de Brueckner rencontre précisément des difficultés, les deux méthodes se combinent tout naturellement, et on doit s'attendre à obtenir de leur combinaison une théorie tout à fait cohérente dans la limite des basses densités.

On verra dans ce qui suit que cet espoir est partiellement rempli par la transformation canonique (1.11). Par exemple, pour une interaction doublement séparable, dont une partie est attractive et l'autre fortement répulsive, la matrice t de Brueckner a un pôle dès que la partie attractive dépasse un certain seuil. Mais dans ce cas, comme nous le verrons, le minimum de $\langle 0 | H | 0 \rangle$ est obtenu avec une transformation canonique non-triviale et le champ source de paires W_k différent de zéro. Une fois cette transformation effectuée, on peut construire une matrice t non-singulière, groupant tous les termes de même comportement à très basse densité. En particulier, la

contribution des termes dominants à basse densité est obtenue par un calcul du premier ordre par rapport à cette matrice \dagger .

CHAPITRE II

LES ÉCHELLES GÉNÉRALISÉES. LES ESSAIS ANTERIEURS

1.- Les échelles mixtes.

La sommation partielle de Brueckner des diagrammes dits en "échelles montantes" (fig. 2.1) a permis de résoudre la difficulté due au coeur dur. Il était donc naturel de penser qu'une sommation plus complète éliminerait la difficulté de divergence.

Quand deux paires particule-trou sont créées, l'approximation de Brueckner admet que seules les particules interagissent plusieurs fois avant d'être séparées, tandis que les trous se propagent librement. Une meilleure approximation consiste à supposer que les trous eux aussi interagissent plusieurs fois avant d'être séparés. Cela revient à remplacer l'interaction simple, non plus par la matrice t de la figure 1.3, mais par la matrice t mixte de la figure 2.1. Deux paires particule-trou p , h sont créées ; les trous interagissent plusieurs fois avant d'être annihilés avec les particules p' qui se propagent librement, tandis que les particules p après avoir interagi plusieurs fois se séparent et continuent à se propager. Fukuda⁽⁴¹⁾ et Klein et Prange⁽⁴²⁾ ont mentionné l'importance de ce mécanisme de diffusion trou-trou. Par exemple, la variation de l'énergie du fondamental au premier ordre par rapport à la matrice t mixte

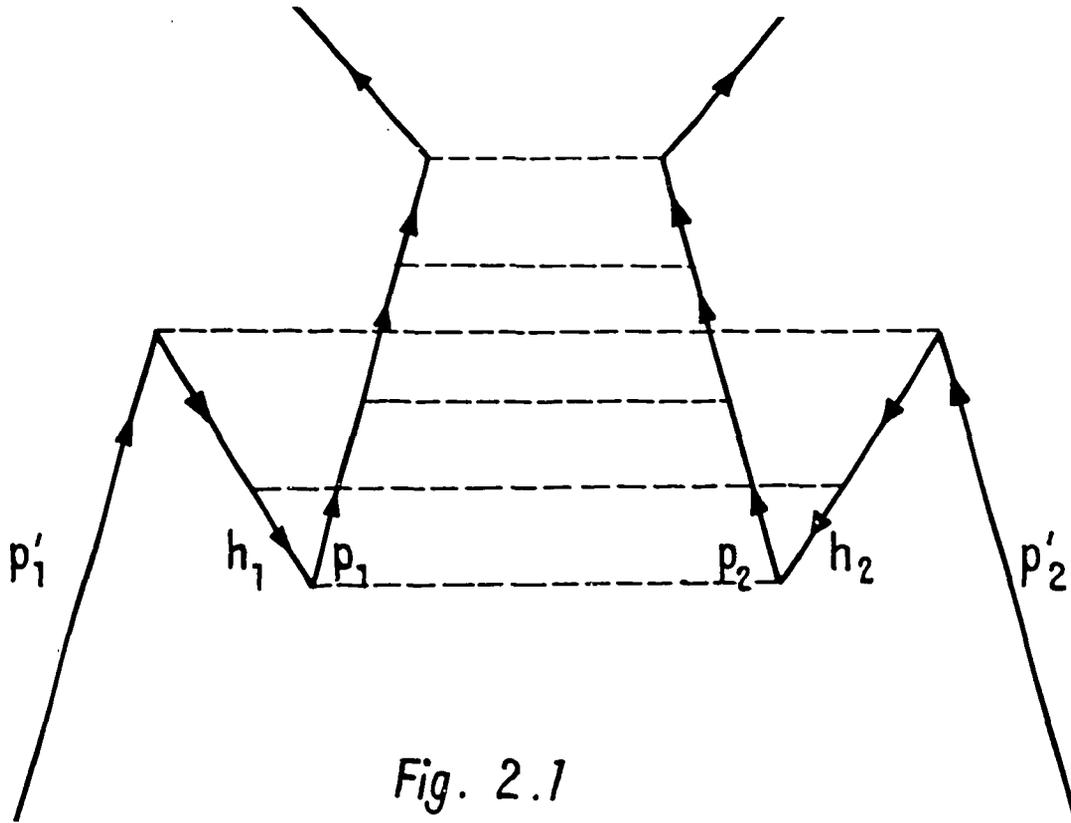


Fig. 2.1

L'échelle mixte

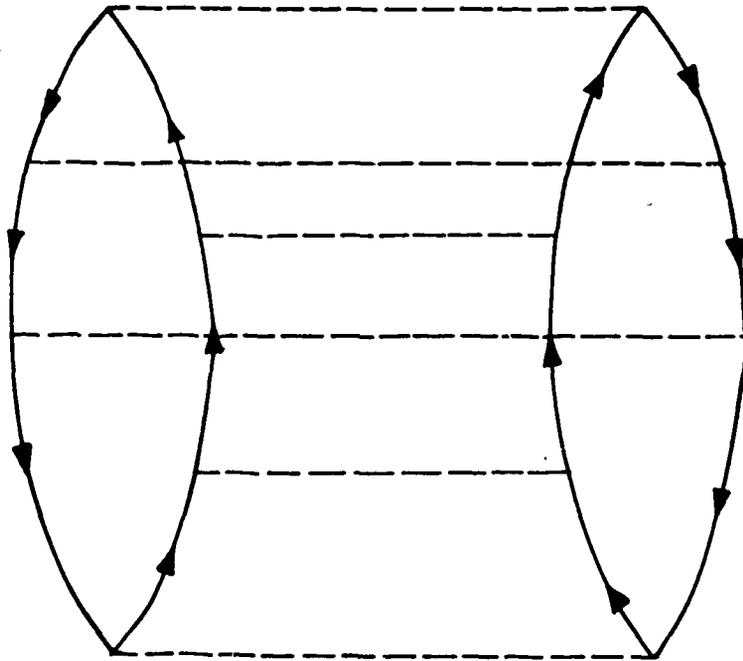


Fig. 2.2

Un diagramme contribuant à l'énergie de liaison dans l'approximation des échelles mixtes.

est la contribution du diagramme 2.2.

Iwamoto ⁽⁴³⁾ a cherché à modifier l'équation de Bethe-Goldstone ⁽¹⁷⁾ pour tenir compte de ce mécanisme. Dans l'équation (1.10) il remplace Q , l'opérateur de projection en dehors de la mer de Fermi, par $Q-P$ où P est le projecteur sur la mer de Fermi. On pouvait espérer améliorer ainsi la solution d'une façon importante. Chisholm et Squires ⁽⁴⁴⁾ ont utilisé la théorie des perturbations indépendante du temps et essayé de construire des solutions non-singulières de l'équation intégrale ainsi obtenue. Pourtant on a pu démontrer ⁽⁴⁵⁾ qu'il n'existait aucune solution régulière. L'inclusion des interactions trou-trou en même temps que celles du type particule-particule rétablit la symétrie par rapport à la surface de Fermi ; les valeurs de la constante de couplage, rendant l'énergie de liaison singulière sont légèrement décalées de sorte que l'ensemble des valeurs singulières devient dense partout lorsque le volume augmente indéfiniment. De plus cette méthode introduit deux singularités du même type qu'auparavant, placées symétriquement par rapport à la surface de Fermi. La nouvelle singularité qui apparaît au-dessus de la surface de Fermi correspond maintenant à une paire de deux trous formant un état lié analogue à celui de Cooper pour les particules.

2.- Les échelles généralisées.

L'approximation suivante consiste à sommer tous les diagrammes à deux boucles de fermions possédant la symétrie

gauche-droite (figure 2.3). Cette approximation est appelée celle des échelles généralisées. On peut écrire systématiquement une équation intégrale pour cette classe de diagrammes comme auparavant et la résoudre exactement. La raison de cette simplicité réside dans l'existence d'un problème équivalent à une particule.

Plusieurs auteurs ⁽⁴⁶⁾ ont observé que le problème d'un fermion dans un champ extérieur est formellement semblable au problème des fermions qui interagissent deux à deux. En fait les deux problèmes sont exactement équivalents à l'approximation des échelles généralisées. Il y a une correspondance bi-univoque entre les diagrammes qui interviennent dans les deux problèmes. Par exemple, le diagramme de la figure 2.4 du problème d'un fermion dans un champ extérieur correspond au diagramme de la figure 2.3 du problème des fermions en interaction. Pour une particule dans un champ extérieur, ce sont tous les diagrammes possibles dont la somme doit donner le résultat exact déterminé directement, ce qu'on peut vérifier aisément. Le problème des fermions en interaction oblige, cependant, à considérer d'autres diagrammes. Ceux de la figure 2.5, par exemple, qui n'ont pas d'équivalent dans le cas d'un champ extérieur.

Nous écrirons l'hamiltonien d'un système de fermions dans un champ extérieur donné par ses éléments de matrice

$\langle k|V|k' \rangle$ sous la forme ⁽⁴⁷⁾:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 = (H_0^{(+)} + H_1^{(+)}) + (H_0^{(-)} + H_1^{(-)}) + H_2 \quad (2.1)$$

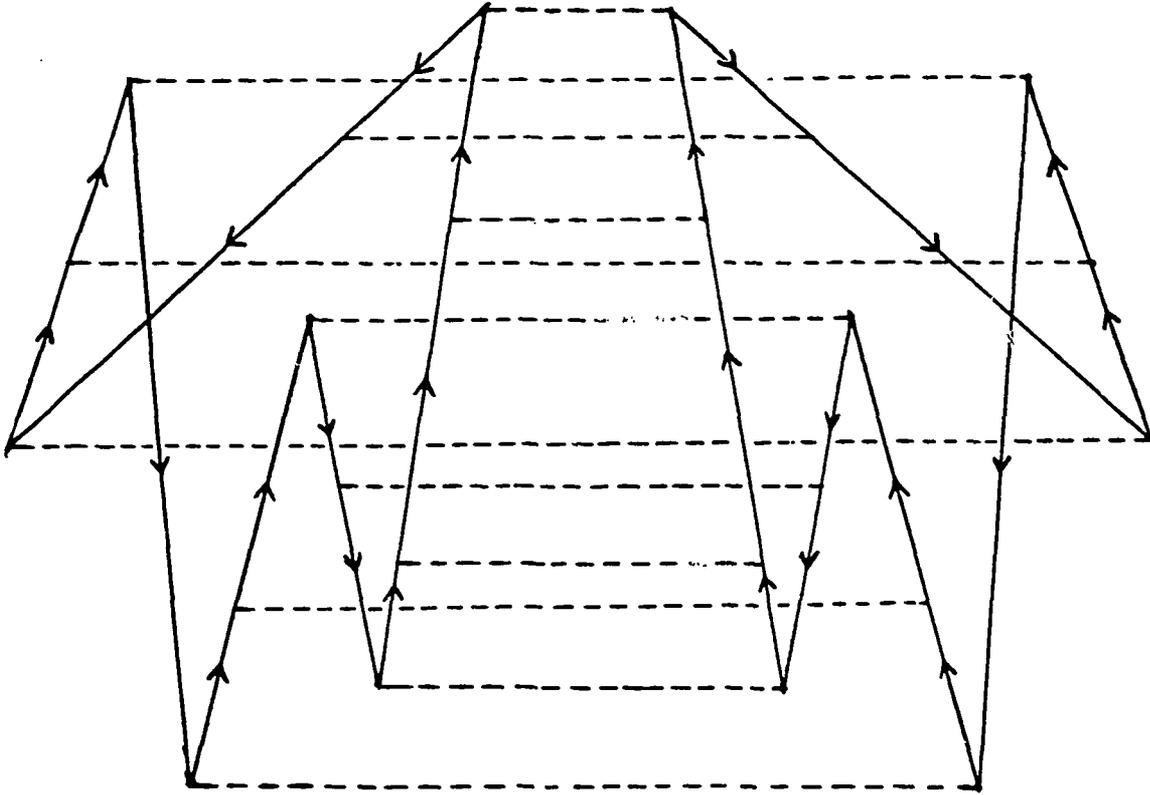


Fig. 2-3

Un diagramme contribuant à l'énergie de liaison dans l'approximation des échelles généralisées.

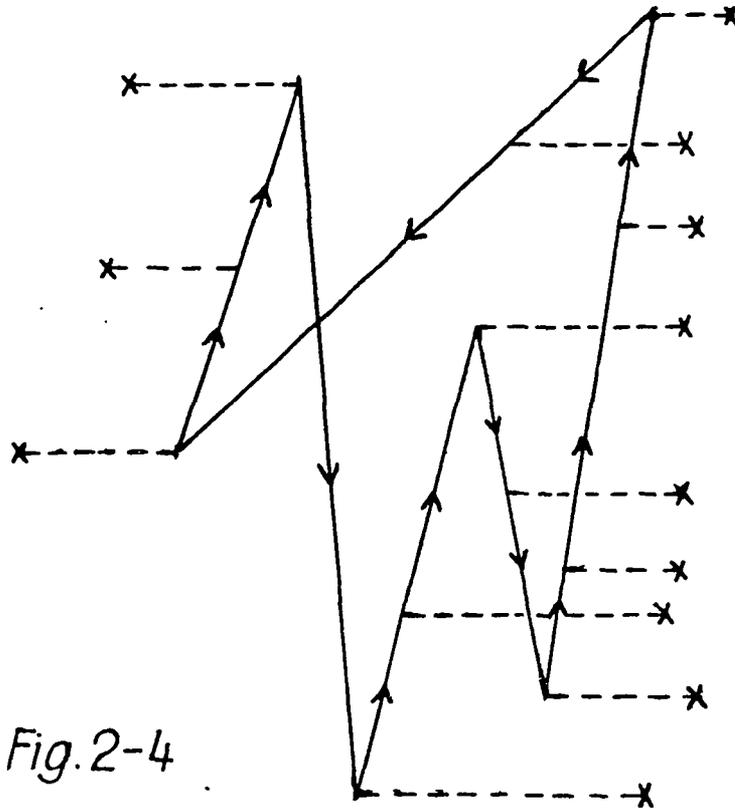


Fig. 2-4

Le diagramme dans le cas d'un potentiel extérieur qui correspond au diagramme 2.3.

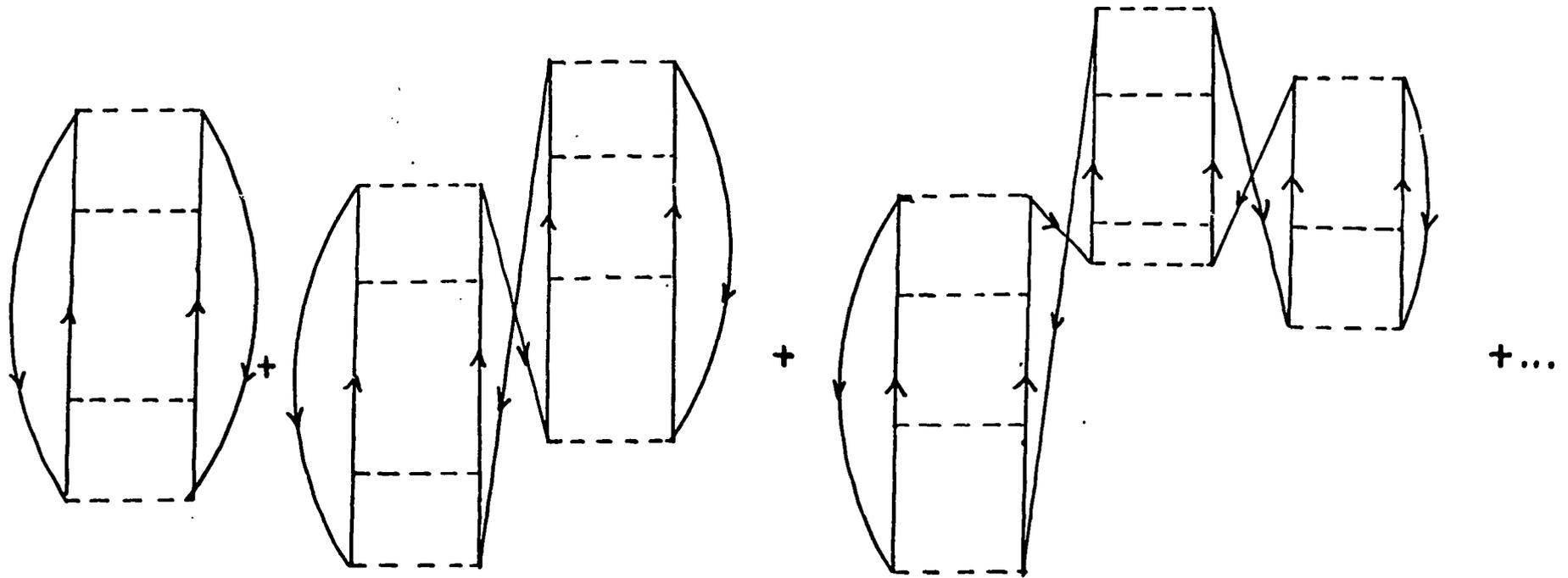


Fig.2-5

Les diagrammes contribuant à l'énergie de liaison des fermions en interaction qui ne correspondent à aucun diagramme pour des fermions dans un potentiel extérieur.

en mettant en évidence les termes relatifs aux états situés au-dessus ou au-dessous de la surface de Fermi. Dans le langage de la seconde quantification, on a :

$$H_0^{(+)} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \xi_{\mathbf{k}} \quad , \quad H_0^{(-)} = \sum_{\mathbf{m}} \varepsilon_{\mathbf{m}} \xi_{\mathbf{m}}^{\dagger} \xi_{\mathbf{m}}$$

$$H_1^{(+)} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (\mathbf{k} | V | \mathbf{k}') \xi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \xi_{\mathbf{k}'} \quad , \quad H_1^{(-)} = - \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'} (\mathbf{m} | V | \mathbf{m}') \xi_{\mathbf{m}}^{\dagger} \xi_{\mathbf{m}'} \quad (2.2)$$

$$H_2 = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{m}} \left\{ (\mathbf{k} | V | \mathbf{m}) \xi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \xi_{\mathbf{m}} + (\mathbf{m} | V | \mathbf{k}) \xi_{\mathbf{m}}^{\dagger} \xi_{\mathbf{k}} \right\}$$

où les opérateurs de création et d'annihilation ξ^{\dagger} , ξ , vérifient les relations d'anticommutation usuelles, et où on a fait la convention que $\mathbf{k} > \mathbf{k}_F$ et $\mathbf{m} < \mathbf{k}_F$ si \mathbf{k}_F est l'impulsion de Fermi.

Dans le cas des diagrammes ayant une symétrie droite-gauche, il est possible de simuler le problème des particules en interaction deux à deux par un problème à un corps dans un champ extérieur choisi de manière appropriée. La raison de ce fait tient à ce qu'en ne considérant que la partie droite (par exemple) des diagrammes (la partie gauche s'obtenant automatiquement par symétrie), on obtient précisément des diagrammes du type de ceux qui interviennent dans l'étude du mouvement d'une particule dans un champ extérieur fixe.

L'approximation des échelles montantes s'obtient en prenant

$$H = H_0 + H_1^{(+)} \quad (2.3)$$

et une interaction à chaque bout de l'échelle, qui diffuse un état de particule dans un état de trou ou réciproquement. L'approximation des échelles mixtes s'obtient en englobant $H_1^{(\pm)}$ aussi

$$H = H_0 + H_1 \quad (2.4)$$

et une interaction à chaque bout de l'échelle comme dans le cas des échelles montantes. On aura l'approximation des échelles généralisées si l'on prend l'hamiltonien complet

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (2.5)$$

Pour simplifier le calcul nous prendrons un potentiel séparable et ne considérerons que les états d'impulsion totale nulle :

$$\langle \ell | V | \ell' \rangle = V(\ell) V(\ell') \quad (2.6)$$

Comme $(H_0^{(+)} + H_1^{(+)})$ et $(H_0^{(-)} + H_1^{(-)})$ sont disjoints, on peut commencer par les diagonaliser séparément. La résolution des équations correspondantes de Schrödinger est immédiate et on a

$$(H_0^{(\pm)} + H_1^{(\pm)}) \eta_{i(\pm)}^+ = \epsilon_i^{(\pm)} \eta_{i(\pm)}^+ \quad (2.7)$$

où les valeurs propres $\varepsilon_i^{(+)}$ de $H_0^{(+)} + H_1^{(+)}$ sont données par

$$\psi(\varepsilon^{(+)}) \equiv \sum_k \frac{V^2(k)}{\varepsilon_k - \varepsilon^{(+)}} = 1, \quad (2.8)$$

et les $\varepsilon_i^{(-)}$, les valeurs propres de $H_0^{(-)} + H_1^{(-)}$, sont donnés par

$$\phi(\varepsilon^{(-)}) \equiv \sum_m \frac{V^2(m)}{\varepsilon_m - \varepsilon^{(-)}} = 1. \quad (2.9)$$

En termes des fonctions propres $\eta_{i(\pm)}^+$ on a

$$H_0 + H_1 = \sum_i \left\{ \varepsilon_i^{(+)} \eta_{i(+)}^+ \eta_{i(+)} + \varepsilon_i^{(-)} \eta_{i(-)}^+ \eta_{i(-)} \right\} \quad (2.10)$$

$$H_2 = - \sum_{i,j} \sqrt{a_i b_j} \left(\eta_{i(+)}^+ \eta_{j(-)} + \eta_{j(-)}^+ \eta_{i(+)} \right) \quad (2.11)$$

où les a_i et b_i sont les inverses des dérivées des fonctions ψ et ϕ aux points $\varepsilon_i^{(\pm)}$:

$$a_i^{-1} = \psi'(\varepsilon_i^{(+)}) = \left(\frac{d\psi}{d\varepsilon^{(+)}} \right)_{\varepsilon^{(+)} = \varepsilon_i^{(+)}} \quad (2.12)$$

et

$$b_i^{-1} = \phi'(\varepsilon_i^{(\zeta)}) = \left(\frac{d\phi}{d\varepsilon^{(\zeta)}} \right)_{\varepsilon^{(\zeta)} = \varepsilon_i^{(\zeta)}} \quad (2.13)$$

On peut résoudre l'équation de Schrödinger

$$(H_0 + H_1 + H_2) \zeta_r^+ = E_r \zeta_r^+ \quad (2.14)$$

tout aussi facilement. Les valeurs propres E_r sont les racines de l'équation

$$\psi(E) + \phi(E) = 1. \quad (2.15)$$

3.- Quelques remarques sur les diverses approximations.

Dans les approximations où, soit quelques-uns soit l'ensemble des diagrammes à deux boucles de fermions possédant une symétrie gauche-droite sont considérés, c'est-à-dire dans les approximations des échelles (i) montantes, (ii) mixtes ou (iii) généralisées, il y a une correspondance bi-univoque

entre les diagrammes qui interviennent dans le calcul de l'énergie du fondamental des deux systèmes suivants :

i)- les fermions dans un champ extérieur,

ii)-les fermions qui interagissent deux à deux.

Au signe près, les contributions attachées aux diagrammes correspondants sont égales. Ce signe vient de la différence dans le nombre des lignes de trous ainsi que dans le nombre des boucles fermées. Ces signes seront correctement donnés si on impose au potentiel de devenir imaginaire dans certains états.

Posons

$$V(\ell) = \lambda_{\ell} \nu_{\ell} \quad (2.16)$$

avec ν_{ℓ} réels.

Si on prend alors

$$\lambda_k = 1, \quad \lambda_m = i, \quad (2.17)$$

on obtient les termes de l'énergie du système des fermions correspondant à une interaction à deux corps attractive ;

tandis que si on prend

$$\lambda_k = i, \quad \lambda_m = 1, \quad (2.18)$$

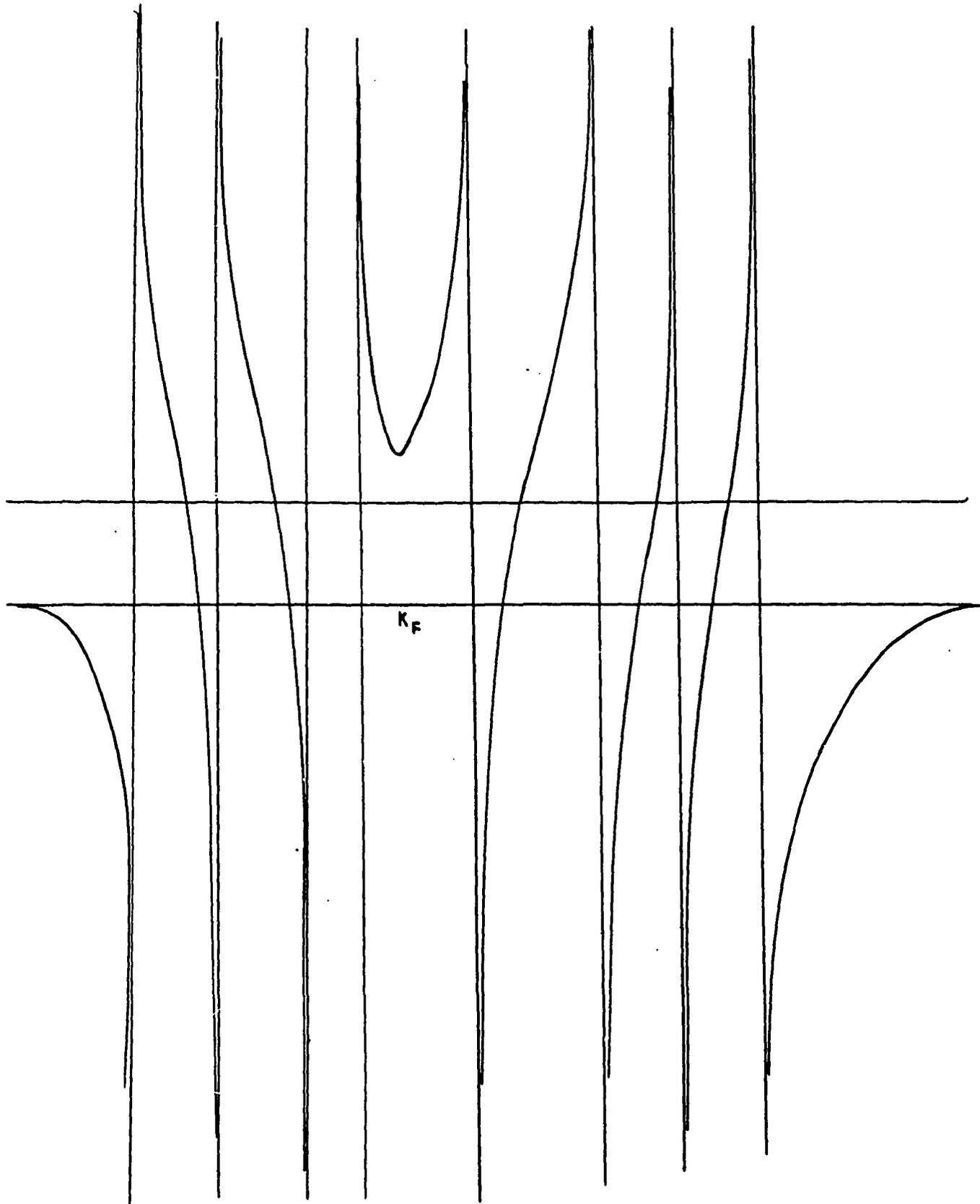
on obtient les termes correspondant à une interaction à deux corps répulsive. La situation

$$\lambda_k = \lambda_m = 1 \quad \text{ou} \quad \lambda_k = \lambda_m = i \quad (2.19)$$

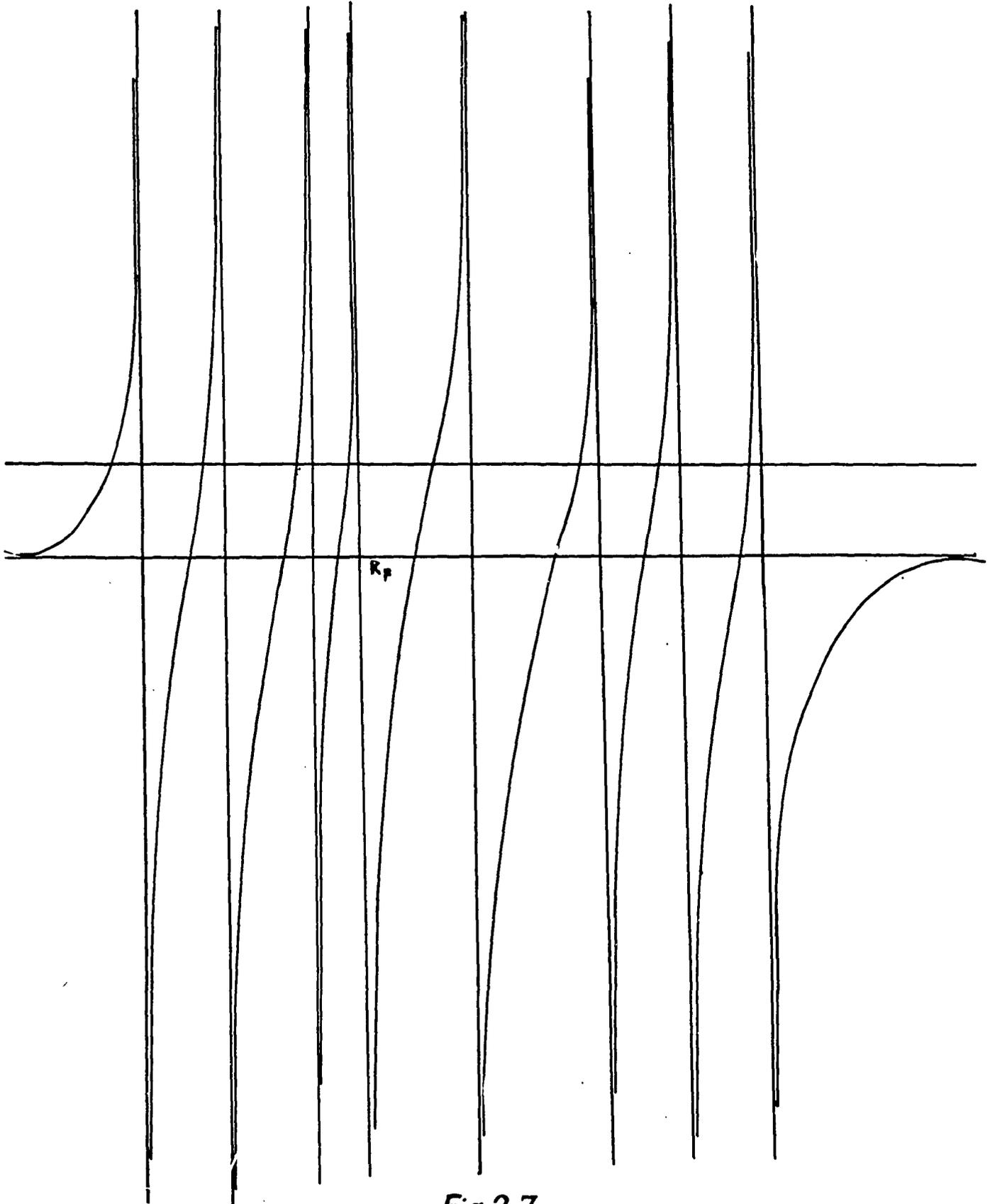
correspond au problème d'un potentiel réel extérieur, respectivement répulsif ou attractif. Dans ce cas, l'hamiltonien est en fait toujours hermitique, alors qu'il ne l'est pas dans les deux cas indiqués plus haut, où le potentiel extérieur introduit a pour but de simuler une interaction à deux corps.

La fonction $\Psi(E) + \Phi(E)$ est tracée sur les figures 2.6 et 2.7 pour les cas (2.17) et (2.19). Pour le cas (2.18) il suffit de renverser la figure 2.4. Les intersections de ces courbes avec l'abscisse $+1$ donnent les racines E_n de l'équation (2.15).

On peut démontrer sans difficulté que dans l'approximation des échelles généralisées, la série des perturbations pour l'énergie du fondamental aura un comportement régulier si et seulement si les racines E_n de l'équation (2.15) sont toutes réelles.

*Fig.2-6*

La fonction $\psi(E) + \phi(E)$ pour le cas de l'équation (2.17).

*Fig.2-7*

La fonction $\psi(E) + \phi(E)$ pour le cas de l'équation (2.19).

Dans le cas de fermions dans un champ extérieur, on voit sur la figure 2.7 que les racines E_n sont toutes réelles pour une constante de couplage arbitraire.

Pour des fermions en interaction répulsive, on voit, en renversant la figure 2.6, que les racines E_n sont toutes réelles pour une constante de couplage arbitraire.

Par contre, dans le cas de fermions en interaction attractive la figure 2.6 montre que toutes les racines E_n sont positives sauf les deux qui se trouvent près de la surface de Fermi, et qui deviennent éventuellement complexes si l'on augmente la constante de couplage au-delà d'une certaine valeur critique g_c . Cette valeur critique g_c tend vers zéro au fur et à mesure que les niveaux proches de la surface de Fermi deviennent plus denses.

On peut donc énoncer les conclusions suivantes (47) :

1)- Pour le problème des fermions dans un champ extérieur :

a)- l'approximation des échelles montantes ou des échelles mixtes ne suffit pas, car dans certains cas l'énergie obtenue est singulière quelle que soit l'intensité du champ extérieur ;

b)- l'approximation des échelles généralisées, qui contient tous les diagrammes possibles dans le cas (1) donne un rayon de convergence fini pour le développement de l'énergie, la somme formelle de la série donnant le résultat exact.

2)- Pour les fermions en interaction :

- a)- en ce qui concerne l'approximation des échelles montantes ou des échelles mixtes la conclusion est la même que pour le problème ci-dessus ;
- b)- l'approximation des échelles généralisées a un rayon de convergence qui tend vers zéro au fur et à mesure qu'on augmente le volume du système c'est-à-dire la densité des niveaux au voisinage de la surface de Fermi. En effet, le problème équivaut à celui des fermions dans un potentiel extérieur non-hermitique et bien que l'on puisse résoudre le problème exactement, la série des perturbations diverge à cause de l'apparition de valeurs propres complexes.

CHAPITRE III

LA TRANSFORMATION CANONIQUE DANS LE CAS DE L'INTERACTION
DES PAIRES D'IMPULSION TOTALE NULLE1.- La notion de quasi-particule.

Pour un système quantique général à un grand nombre de degrés de liberté, il est empiriquement bien connu que l'état fondamental et les états excités les plus bas peuvent être décrits par un petit nombre d'excitations élémentaires presque indépendantes ou quasi-particules. En réalité ces excitations élémentaires ne sont pas tout à fait indépendantes, c'est-à-dire qu'il existe une interaction, en principe faible, entre les quasi-particules. La validité de cette description est alors affectée d'autant plus que l'on considère des états plus fortement excités.

Par exemple, le champ électromagnétique, décrit classiquement par les vecteurs électrique \vec{E} et magnétique \vec{H} , est très convenablement décrit dans la théorie quantique par des photons. Les photons n'interagissent pratiquement pas et la description est alors valable pour tous les états excités, tandis que la description par des phonons d'un réseau cristallin n'est valable que pour les états dont l'excitation n'est pas trop forte. Nous trouverons un exemple analogue dans notre système de fermions.

2.- Les potentiels self-consistants.

Il sera commode de considérer un système avec un nombre variable de particules et d'en fixer le nombre moyen à N . L'hamiltonien du nouveau système s'écrit :

$$H \equiv \mathcal{H} - \lambda N = \sum_{\mathbf{k}} T_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum (rs|V|mn) a_r^{\dagger} a_s^{\dagger} a_n a_m, \quad (3.1)$$

avec

$$T_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 - \lambda. \quad (3.2)$$

D'après Bogoliubov (14,40) nous prenons comme hamiltonien non-perturbé H_0 , la forme quadratique générale en a et a^{\dagger} qui conserve les impulsions (propriété de l'invariance par translation) :

$$H = H_0 + H_1, \quad (3.3)$$

$$H_0 = \sum z_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum (W_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + W_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}), \quad (3.4)$$

et par conséquent

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum (rs|V|mn) a_r^{\dagger} a_s^{\dagger} a_n a_m - \sum \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \sum (W_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + W_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}), \quad (3.5)$$

avec

$$W_{-k} = -W_k, \quad \omega_k^* = \omega_k, \quad (3.6)$$

où l'on a posé

$$Z_k \equiv T_k + \omega_k = k^2 - \lambda + \omega_k. \quad (3.7)$$

La diagonalisation de H_0 est immédiate. On introduit les nouveaux opérateurs α , α^\dagger définis par la relation linéaire qui conserve les impulsions :

$$a_k = u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^\dagger \quad (3.8)$$

Pour que les α et α^\dagger soient aussi des opérateurs de fermions, c'est-à-dire qu'ils vérifient les mêmes relations (1.3) d'anti-commutation que les a , a^\dagger , il faut et il suffit que les u_k , v_k vérifient les relations suivantes :

$$\begin{aligned} u_k v_{-k} + u_{-k} v_k &= 0, \\ |u_k|^2 + |v_k|^2 &= 1; \end{aligned} \quad (3.9)$$

d'où l'on déduit aussi que

$$u_k^* v_k + u_{-k}^* v_{-k} = 0,$$

$$|u_{-k}| = |u_k|, \quad |v_{-k}| = |v_k|. \quad (3.10)$$

Puis on exprime H_0 en fonction des nouveaux opérateurs :

$$H_0 = U_0 + \sum E_k \alpha_k^+ \alpha_k + \frac{1}{2} \sum (F_k \alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ + F_k^* \alpha_{-k} \alpha_k), \quad (3.11)$$

et l'on impose la condition que les termes non-diagonaux soient nuls :

$$F_k = 0. \quad (3.12)$$

Le vide des quasi-particules est défini par les relations

$$\alpha_k |0\rangle = 0, \quad \text{quel que soit } k. \quad (3.13)$$

Il est très commode de calculer les quantités U_0 , E_k et F_k en employant le théorème de Wick ⁽⁴⁸⁾ ce qui donne

$$\begin{aligned}
U_0 \equiv (0|H_0|0) &= \sum \left\{ z_k \overline{a_k^+ a_k} + \frac{1}{2} \left(W_k \overline{a_k^+ a_{-k}^+} + W_k^* \overline{a_{-k} a_k} \right) \right\} \\
&= \sum \left\{ z_k |v_k|^2 + \frac{1}{2} \left(W_k u_{-k}^* v_k^* + W_k^* u_{-k} v_k \right) \right\}, \quad (3.14)
\end{aligned}$$

$$E_k = (0| \alpha_k H_0 \alpha_k^+ |0) - (0|H_0|0), \quad (3.15)$$

et

$$F_k = (0| \alpha_{-k} \alpha_k H_0 |0), \quad (3.16)$$

où la contraction \overline{ab} désigne la valeur moyenne de ab dans le vide des α :

$$\overline{ab} = (0|ab|0). \quad (3.17)$$

En faisant l'hypothèse simplificatrice que

$$\omega_{-k} = \omega_k \quad (3.18)$$

on a

$$E_{-k} = E_k = z_k (|u_k|^2 - |v_k|^2) + W_k u_k^* v_{-k}^* + W_k^* u_k v_{-k}. \quad (3.19)$$

L'équation (3.12) s'écrit

$$F_k \equiv 2z_k u_k^* v_k + W_k u_k^* u_{-k}^* + W_k^* v_k v_{-k} = 0, \quad (3.20)$$

ce qui donne après quelques manipulations

$$\frac{2u_k v_{-k}}{|u_k|^2 - |v_k|^2} = \frac{W_k}{z_k}, \quad (3.21)$$

ou encore

$$2u_k v_{-k} = \frac{W_k}{\sqrt{z_k^2 + |W_k|^2}} e^{i\theta_k}, \quad (3.22)$$

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = \frac{z_k}{\sqrt{z_k^2 + |W_k|^2}} e^{i\theta_k}, \quad (3.23)$$

et donc

$$E_k = \sqrt{z_k^2 + |W_k|^2} e^{i\theta_k}; \quad (3.24)$$

mais $|u_k|^2$, $|v_k|^2$ et Z_k étant réels, $\theta_k = 0$ ou π .

Si l'on veut retrouver la mer de Fermi comme vide dans le cas où W_k serait nul, il faut choisir $\theta_k = 0$ sauf dans le voisinage de $Z_k = 0$; on a donc, loin de $Z_k = 0$:

$$|u_k|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{Z_k}{\sqrt{Z_k^2 + |W_k|^2}} \right), \quad (3.25)$$

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{Z_k}{\sqrt{Z_k^2 + |W_k|^2}} \right).$$

3.- La théorie des perturbations.

Il serait possible d'exprimer la perturbation H_1 en fonction des opérateurs α , α^\dagger . Mais nous trouverons plus commode de garder les opérateurs a , a^\dagger dans H_1 et d'employer le théorème de Wick. Les seules contractions non-nulles sont alors

$$\overline{a_k^\dagger a_{k'}} = (0 | a_k^\dagger a_{k'} | 0) = v_k^* v_{k'} \delta_{k, k'},$$

$$\overline{a_k a_{k'}^\dagger} = (0 | a_k a_{k'}^\dagger | 0) = u_k u_{k'}^* \delta_{k, k'},$$

$$\overline{a_k a_{k'}} = (0 | a_k a_{k'} | 0) = u_k v_{k'} \delta_{k, -k'},$$

$$\overline{a_k^\dagger a_{k'}^\dagger} = (0 | a_k^\dagger a_{k'}^\dagger | 0) = v_k^* u_{k'}^* \delta_{k, -k'};$$

(3.26)

et elles seront représentées respectivement par les graphiques sur la figure 3.1.

Les deux premières contractions sont les contractions normales habituelles, les deux autres sont les contractions "anormales" introduites par la transformation de Bogoliubov.

Le développement de Goldstone (9), Hugenholtz (10) et Bloch (11) pour le changement de l'énergie de liaison ainsi que pour le propagateur à une particule à la température nulle peut être établi comme d'habitude mais en tenant compte des contractions "anormales" supplémentaires. Dans cette description chaque ligne intérieure doit être munie de deux flèches, une à chaque extrémité (fig. 3.1). Tout terme de la série des perturbations peut encore être représenté par un diagramme : la figure 3.2 montre ceux de H_1 , qui seront appelés interaction V -, w - ou W -.

Comme dans la formulation habituelle, le changement de l'énergie de liaison de l'état fondamental de H_0 , dû à H_1 , est la somme des contributions associées à tous les diagrammes vide-vide connexes. De la même façon, le propagateur à une particule est la somme des contributions associées à tous les diagrammes connexes, ayant deux lignes extérieures, l'une entrant par le bas et l'autre sortant par le haut. La contribution associée à un diagramme se calcule en formant le produit de plusieurs facteurs selon les règles suivantes :

- 1)- à chaque interaction est associé ou bien l'élément de la matrice $\langle rs|V|mn\rangle$ ou bien les facteurs correspondants w_k , W_k ;

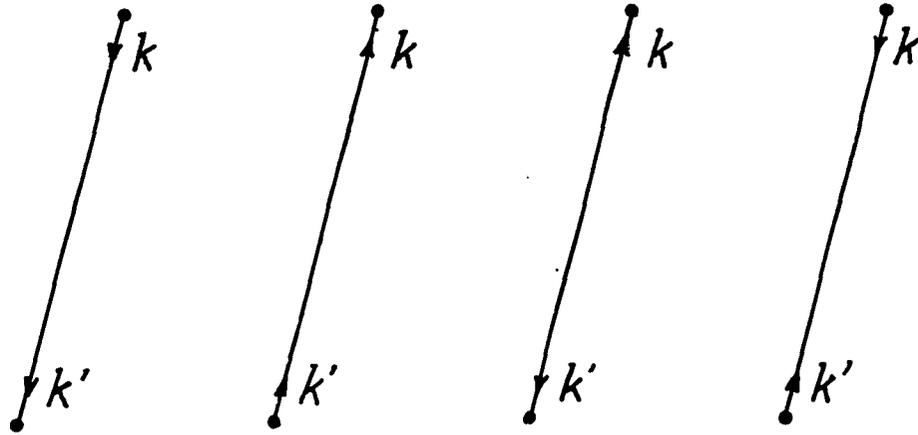


Fig.3-1

La représentation graphique des contractions.

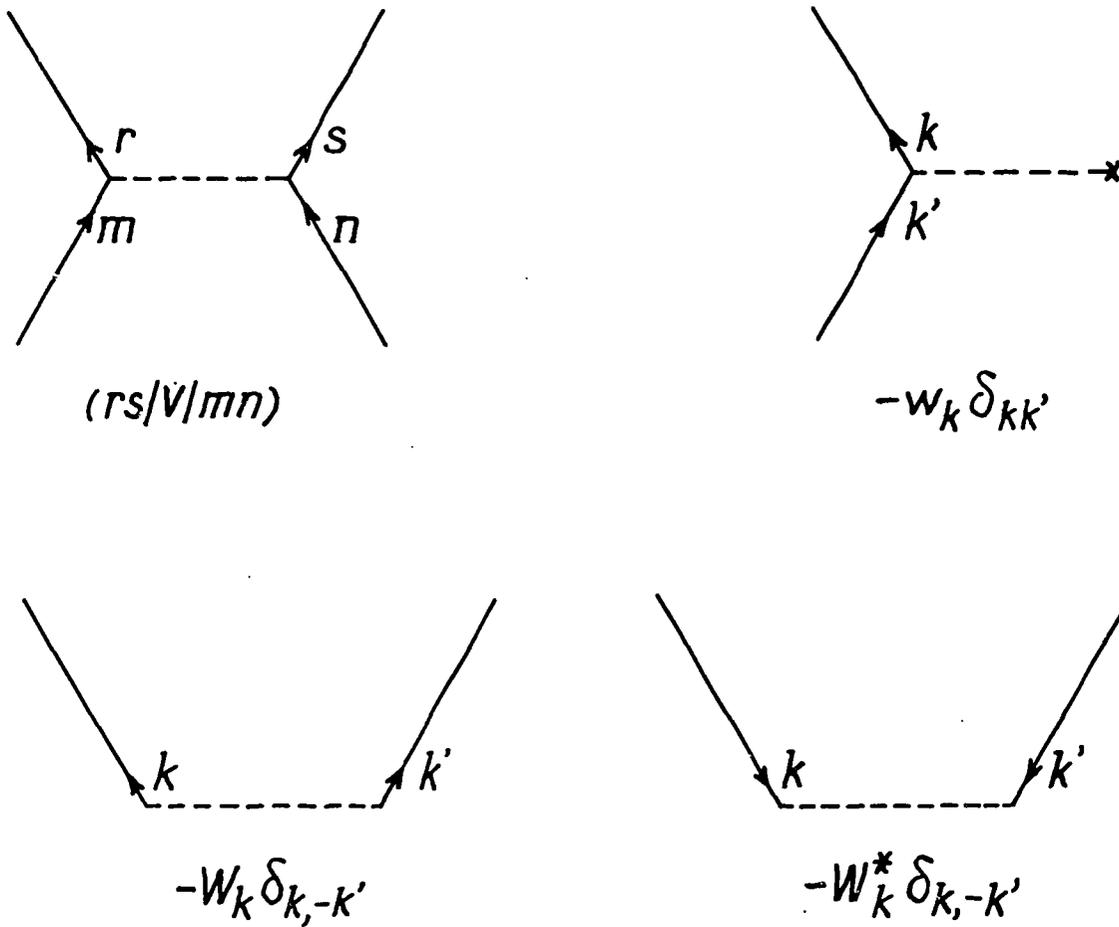


Fig.3-2

La représentation graphique de la perturbation

- 2)- les dénominateurs d'énergie, c'est-à-dire les inverses des énergies d'excitation changés de signe figurant entre chaque paire d'interactions consécutives ;
- 3)- les facteurs \mathcal{U} ou \mathcal{V} pour chaque flèche comme indiqués sur la figure 3.3 ;
- 4)- une fonction δ pour chaque ligne (conservation des impulsions), indiquée dans la liste des contractions non-nulles (relations 3.26 et figure 3.1) ;
- 5)- les opérateurs de création α^+ à gauche pour les lignes sortant du haut et les opérateurs d'annihilation α à droite pour les lignes entrant par le bas ;
- 6)- un signe $(-)^P$ où P est la parité de la permutation qu'il faut effectuer pour amener côte à côte les opérateurs contractés. Pour déterminer ce signe, imaginons que l'on inverse la direction de toute flèche à droite d'une interaction W et que les deux extrémités de W soient confondues. Soit l le nombre des boucles fermées ainsi obtenues et i le nombre de paires de flèches dont il faut inverser la direction pour qu'il devienne possible de parcourir chaque boucle fermée ou chaque ligne ouverte dans un sens correspondant continuellement à l'orientation des lignes ; désignons par h le nombre des paires de flèches dirigées vers le bas une fois ces opérations effectuées. Le terme associé à un diagramme est alors affecté du signe $(-)^{i+h+l}$.

Les diagrammes des figures 4.4 (c), (d) et (e) donnent un signe plus parce qu'ils comprennent une boucle

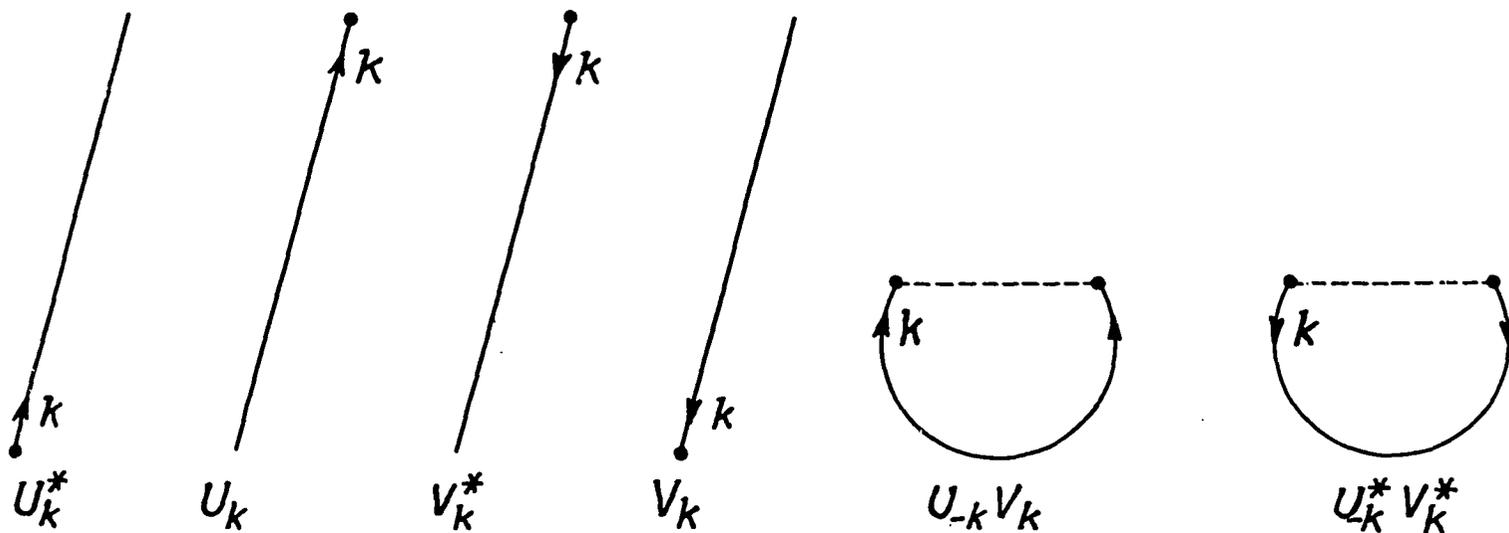


Fig. 3-3

Les facteurs de poids correspondant aux diverses flèches.

fermée et une paire de flèches dirigées vers le bas.

Enfin, il faut effectuer la sommation sur l'ensemble des valeurs des états associés à chacune des lignes du diagramme.

4.- L'interaction entre paires d'impulsion totale nulle.*

Le procédé consistant à introduire les potentiels ω_k et W_k (section 2) n'est pas très commode pour discuter de l'existence des singularités de la théorie des perturbations qui en découle (section 3). Cependant, il est possible de mettre le problème sous une forme un peu différente.

Effectuons la transformation (3.8) et supposons que les paramètres u_k , v_k soient déterminés en minimisant la valeur moyenne de H dans le vide $(0|H|0)$ avec les restrictions (3.9) où le vide $|0\rangle$ est défini par l'équation (3.13). On obtient ainsi l'équation

$$F_k \equiv (0|\alpha_{-k} \alpha_k H|0) = 0, \quad (3.27)$$

* Le contenu de cette section et des sections 5 et 6 résulte d'un travail fait en collaboration avec Monsieur R. BALIAN (49).

qui exprime la compensation des "diagrammes dangereux". Les énergies d'excitation à une quasi-particule sont données par

$$E_{\mathbf{k}} = \langle 0 | \alpha_{\mathbf{k}} H \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} | 0 \rangle - \langle 0 | H | 0 \rangle. \quad (3.28)$$

Prenons comme hamiltonien non perturbé \mathcal{H}_0 la partie quadratique en α , α^{\dagger} :

$$\mathcal{H}_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} \quad (3.29)$$

et par conséquent

$$\mathcal{H}_1 = H - \mathcal{H}_0 \quad (3.30)$$

Puis dans le développement en puissances de \mathcal{H}_1 de l'énergie de liaison de l'état fondamental de H regroupons les termes qui ont le même comportement à la limite des très faibles densités, ce qui nous conduit à la matrice \mathfrak{t} . Le problème est alors de savoir si cette matrice n'a plus de singularité et, si c'est le cas, si le développement perturbatif en fonction de cette matrice \mathfrak{t} converge. Nous trouverons dans la section 5 la réponse à la première partie de la question.

Dans cette section et la suivante, nous considérons une interaction entre les paires d'impulsion totale nulle :

$$(m, -m | V | n, -n) \equiv V_{mn} , \quad (3.31)$$

les autres $(rS | V | mn)$ sont nuls. L'hamiltonien s'écrit

$$H = \sum_m T_m (a_m^+ a_m + a_{-m}^+ a_{-m}) + 2 \sum_{m,n} V_{mn} a_m^+ a_{-m}^+ a_{-n} a_n . \quad (3.32)$$

Par raison de commodité, les sommes sont effectuées sur la moitié des états à une particule ; nous ferons de même dans cette section et la suivante.

La valeur moyenne de H dans le vide des α est donnée par le théorème de Wick

$$\langle 0 | H | 0 \rangle = 2 \sum_m (T_m + V_{mm} |v_m|^2) |v_m|^2 + 2 \sum_{m,n} V_{mn} u_{-m}^* v_m^* u_{-n} v_n . \quad (3.33)$$

On introduit les variables x_m définies par

$$x_m = 2 u_m v_{-m} , \quad (3.34)$$

de sorte que l'on ait

$$\begin{aligned} |u_m|^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \epsilon_m \sqrt{1 - |x_m|^2} \right) , \\ |v_m|^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \epsilon_m \sqrt{1 - |x_m|^2} \right) , \end{aligned} \quad (3.35)$$

avec

$$\epsilon_m = \pm 1. \quad (3.36)$$

On peut alors écrire :

$$\begin{aligned} \langle 0|H|0\rangle = \sum_m \left\{ \epsilon_m \left(1 - \epsilon_m \sqrt{1 - |\alpha_m|^2} \right) - \frac{1}{2} V_{mm} |\alpha_m|^2 \right\} \\ + \frac{1}{2} \sum_{m,n} V_{mn} \alpha_m^* \alpha_n, \end{aligned} \quad (3.37)$$

où nous avons posé

$$\epsilon_m = T_m + V_{mm} = m^2 - \lambda + V_{mm} \quad (3.38)$$

Les valeurs de α_m (avec $|\alpha_m| \leq 1$) et de ϵ_m déterminent complètement la transformation canonique et par conséquent les opérateurs des quasi-particules, à un facteur de phase trivial près. Les conditions (3.9) impliquent en outre que les α_m sont anti-symétriques :

$$\alpha_{-m} = -\alpha_m \quad (3.39)$$

La minimisation de (3.37) par rapport à ϵ_m est

immédiate, et donne

$$\epsilon_m = \frac{\zeta_m}{|\zeta_m|}, \quad (3.40)$$

d'où

$$\begin{aligned} \langle 0|H|0 \rangle = \sum_m \left\{ \zeta_m - |\zeta_m| \sqrt{1 - |x_m|^2} - \frac{1}{2} V_{mm} |x_m|^2 \right\} \\ + \frac{1}{2} \sum_{m,n} V_{mn} x_m^* x_n. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Pour un point stationnaire de $\langle 0|H|0 \rangle$, $|x_m|$ est inférieur à 1 pour toutes les valeurs de m tel que ζ_m est différent de zéro, et les dérivées partielles correspondantes sont nulles :

$$2 \frac{\partial}{\partial x_m^*} \langle 0|H|0 \rangle = \frac{|\zeta_m|}{\sqrt{1 - |x_m|^2}} x_m + \sum_{\substack{n \\ n \neq m}} V_{mn} x_n = 0. \quad (3.42)$$

L'équation (3.28) s'écrit :

$$\begin{aligned} E_m &= \langle 0|\alpha_m H \alpha_m^\dagger|0 \rangle - \langle 0|H|0 \rangle \\ &= \zeta_m \epsilon_m \sqrt{1 - |x_m|^2} - V_{mm} - \operatorname{Re} \sum_{\substack{n \\ n \neq m}} V_{mn} x_m^* x_n. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Soit, compte tenu des équations (3.40) et (3.42) :

$$(E_m + V_{mm})\sqrt{1 - |\alpha_m|^2} = |\zeta_m|, \quad (3.44)$$

$$E_m \alpha_m + \sum_n V_{mn} \alpha_n = 0. \quad (3.45)$$

Ces équations sont vérifiées même pour les valeurs de m qui annulent ζ_m , et n'expriment que la stationnarité de $(0|H|0)$

En tenant compte des équations (3.44) et (3.45) on peut écrire

$$(0|H|0) = U \equiv -\frac{1}{2} \sum_m \frac{(E_m + V_{mm} - \zeta_m)^2}{E_m + V_{mm}}. \quad (3.46)$$

Nous ferons ici les remarques suivantes :

i)- la transformation "triviale"

$$\alpha_m = 0, \quad E_m = |\zeta_m| - V_{mm}, \quad U_0 = \sum_m (\zeta_m - |\zeta_m|) \quad (3.47)$$

est toujours solution des équations (3.44) et (3.45) ;

ii)- la variation du premier ordre du spectre des quasi-particules est nulle dans l'approximation de Hartree-Fock ;

$$\begin{aligned} \omega_m &= 2 V_{mm} |v_m|^2, \\ W_m &= - \sum_n V_{mn} x_n ; \end{aligned} \quad (3.48)$$

$$\delta E_m = (0 | \alpha_m H \alpha_m^+ - H | 0) - (0 | \alpha_m \mathcal{H}_0 \alpha_m^+ - \mathcal{H}_0 | 0) = 0, \quad (3.49)$$

où \mathcal{H}_0 est donné par les équations (3.4), (3.7) et (3.48) ;

iii)- la théorie des perturbations (sections 2 et 3) est complètement équivalente au procédé ci-dessus, si l'on fait le choix (3.48) pour les potentiels ω_m et W_m .

4.1.- Une représentation géométrique.

Pour rendre la démonstration plus intuitive, nous considérons l'espace des points de coordonnées (E_m) . L'ensemble des points (E_m) correspondant aux solutions non-triviales de l'équation (3.45) sera situé sur la surface

$$D(E_m) \equiv \det M = 0, \quad (3.50)$$

où la matrice M est définie par l'égalité suivante :

$$M = [M_{mn}] = [E_m \delta_{mn} + V_{mn}] \quad (3.51)$$

Cette surface est le lieu géométrique des points (E_m) tels que la matrice M ait au moins une valeur propre nulle ; elle a donc plusieurs nappes divisant l'espace en régions dans lesquelles M a un nombre fixe de valeurs propres de chaque signe (fig. 3.4 et 3.5).

Considérons maintenant la famille des surfaces à un paramètre C :

$$U(E_m) \equiv -\frac{1}{2} \sum_m \frac{(E_m + V_{mm} - |S_m|)^2}{E_m + V_{mm}} + \sum_m (S_m - |S_m|) \quad (3.52)$$

$$\equiv -\frac{1}{2} \sum_m \frac{(E_m + V_{mm} - S_m)^2}{E_m + V_{mm}} \quad (3.53)$$

Intuitivement on voit que pour chaque solution (E_m, χ_m) des équations (3.44), (3.45), le point (E_m) est un point de contact de la surface $D = 0$ avec une surface de la famille (3.53) et inversement à chaque point de contact (E_m) de la surface $D = 0$ avec une quelconque des surfaces de la famille (3.53) on peut associer au moins un ensemble χ_m tel que (E_m, χ_m) soit une solution des équations (3.44), (3.45). Pour démontrer le résultat moyennant quelques restrictions qui seront précisées plus tard, Nous utiliserons un espace plus vaste que le précédent, complété par les variables χ_m (section 4.2).

La valeur de $(0|H|0)$ pour une solution de (70), (71) est la constante C qui correspond à la surface $U(E_m) = C$ tangente à $D = 0$; la valeur la plus basse de $(0|H|0)$ correspond

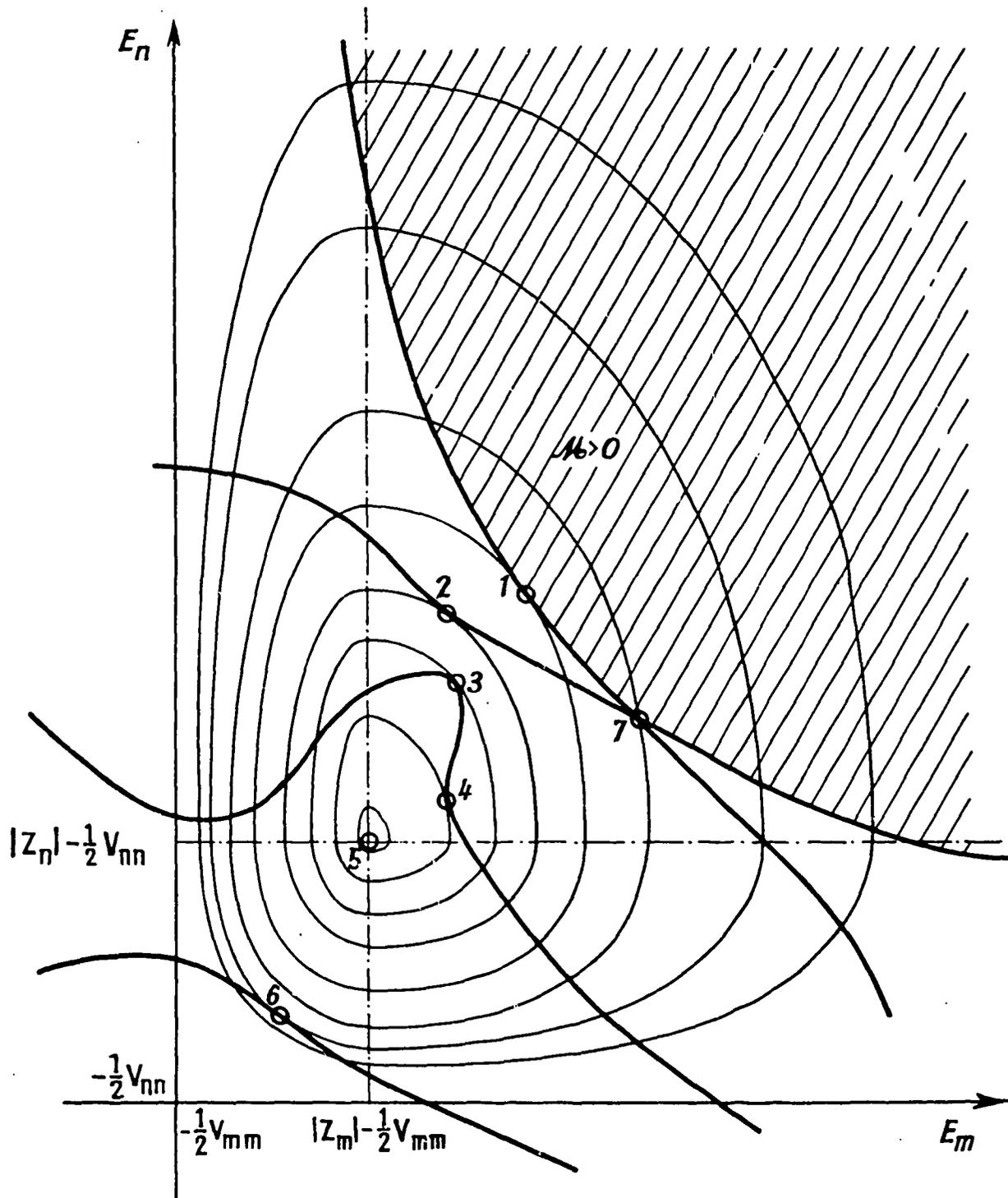


Fig. 3-4

Une représentation schématique des équations variationnelles; la surface $D = 0$ est représentée par les traits épais, la famille $U = C$ par les traits fins. Le paramètre C diminue lorsqu'on va de la solution triviale 5 vers l'extérieur. La solution 1 donne l'énergie la plus basse, parce qu'elle se trouve sur la nappe $M \geq 0$. Les points 6 et 7 ne correspondent à aucune solution.

à la surface $U = C$ qui se trouve le plus loin possible de l'origine ($E_m = |\Sigma_m| - V_{mm}$). On peut penser que cette solution se trouve sur la nappe de $D = 0$ ayant les plus grandes valeurs des coordonnées (E_m), c'est-à-dire la nappe sur laquelle la matrice M est positive semi-définie. Cette intuition est justifiée, comme nous le montrerons (sections 4.3, 4.4 et 4.5) : la valeur maximale de la fonction $U(E_m)$, dans la région où M est positive semi-définie, est le minimum absolu de $(0|H|0)$. De plus ce maximum n'est atteint qu'en un point unique (E_m) (section 4.3), bien qu'il puisse exister, cependant, plusieurs solutions pour l'ensemble des variables x_m (section 4.5).

4.2.- Existence d'une solution des équations (3.44) (3.45) pour un point de contact ($E_m^{(0)}$) de la surface $D = 0$ avec une surface $U = C$, et réciproque.

Nous distinguerons deux cas dans la discussion, suivant que le point ($E_m^{(0)}$) est un point régulier ou non de la surface $D = 0$.

1°.- Supposons que ($E_m^{(0)}$) soit un point régulier de $D = 0$, alors les quantités

$$\left(\frac{\partial D}{\partial E_m} \right)_{(E_m^{(0)})} \equiv D_m^m (E_m^{(0)}) \quad (3.54)$$

ne sont pas toutes nulles. La quantité $D_n^m (E_m)$ est le mineur

d'ordre $(q-1)$ de la matrice M d'ordre q , associé à l'élément M_{mn} ; le nombre de dimensions de l'espace des (E_m) est supposé fini et égal à q . L'ensemble des x_m , qui vérifie l'équation (3.45), est donc unique et donné par les relations

$$\frac{x_m}{D_m^p} = \frac{x_n}{D_n^p}, \text{ quel que soit } p. \quad (3.55)$$

D'autre part, la propriété d'hermiticité de M permet d'écrire

$$D_m^{p*} = D_p^m \quad (3.56)$$

On déduit des équations (3.55) et (3.56) que

$$|x_m|^2 \propto D_m^m \quad (3.57)$$

Soit alors $(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})$ une solution des équations (3.44), (3.45), où $(E_m^{(0)})$ est un point régulier de $D = 0$; les équations (3.54), (3.57), (3.44) et (3.52) nous donnent

$$\left(\frac{\partial D}{\partial E_m}\right)_{(E_m^{(0)})} = D_m^m \propto |x_m^{(0)}|^2 = 1 - \frac{|x_m|^2}{(E_m^{(0)} + V_{mm})^2} \equiv -2 \left(\frac{\partial U}{\partial E_m}\right)_{(E_m^{(0)})} \quad (3.58)$$

Donc $(E_m^{(0)})$ est un point de contact de $D = 0$ avec $U(E_m) = C = U(E_m^{(0)})$.

Inversement si le point $(E_m^{(0)})$ supposé régulier de $D = 0$ est un point de contact de $D = 0$ avec une surface $U = C$, on a

$$\left(\frac{\partial U}{\partial E_m}\right)_{(E_m^{(0)})} \propto \left(\frac{\partial D}{\partial E_m}\right)_{(E_m^{(0)})} = D_m^m(E_m^{(0)}). \quad (3.59)$$

Puisque $(E_m^{(0)})$ est un point régulier de $D = 0$, le rang de M est $q-1$, et la solution unique (x_m) de l'équation (3.45) avec $E_m = E_m^{(0)}$ vérifie la relation (3.57). On peut donc choisir la constante arbitraire qui multiplie les x_m , de façon à vérifier l'équation (3.44).

2°.- Supposons maintenant que $(E_m^{(0)})$ soit un point singulier de la surface $D = 0$.

En ce cas, toutes les dérivées du premier ordre $\frac{\partial D}{\partial E_m}$ s'annulent en $(E_m^{(0)})$ et le raisonnement précédent est en défaut.

Au lieu de $D = 0$ et $U = C$, considérons la surface

$$D_1 = D_1(E_m, x_m) \equiv \sum_{m,n} M_{mn} x_m^* x_n = 0, \quad (3.60)$$

ainsi que la famille de cylindres

$$U_1(E_m, x_m) \equiv U(E_m) = C, \quad (3.61)$$

dans l'espace plus vaste des variables E_m , $\text{Re } x_m$ et $\text{Im } x_m$. La surface (3.60) n'a aucune singularité sauf les singularités triviales $x_m = 0$.

Les projections des surfaces (3.60) et (3.61) sur le sous-espace des variables (E_m) sont les surfaces $D = 0$ et $U = C$. A chaque point de contact de $D_1 = 0$ avec $U_1 = C$ dans l'espace des variables (E_m, x_m) correspond un point de contact de $D = 0$ et $U = C$ dans le sous-espace des variables (E_m) . Mais $D = 0$ peut avoir des points singuliers bien que $D_1 = 0$ n'en ait pas.

Si donc $(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})$ est une solution des équations (3.44), (3.45), alors

$$\left(\frac{\partial U_1}{\partial E_m} \right)_{(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})} \equiv 1 - \frac{\sum_m^2}{(E_m^{(0)} + V_{mm})^2} = |x_m^{(0)}|^2 \equiv \left(\frac{\partial D_1}{\partial E_m} \right)_{(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})}, \quad (3.62)$$

et

$$\left(\frac{\partial U_1}{\partial x_m^*} \right)_{(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})} \equiv 0 = \sum_{m,n} M_{mn} (E_m^{(0)}) x_n^{(0)} \equiv \left(\frac{\partial D_1}{\partial x_m^*} \right)_{(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})}, \quad (3.63)$$

ce qui démontre bien que $(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})$ est un point de contact de la surface $D_1 = 0$ avec $U_1 = C$.

Inversement si $(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})$ est un point de contact de $D_1 = 0$ avec $U_1 = C$, on a

$$\left(\frac{\partial D_1}{\partial E_m} - A \frac{\partial U_1}{\partial E_m} \right)_{(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})} \equiv |x_m^{(0)}|^2 - A \left(1 - \frac{\sum_m^2}{(E_m^{(0)} + V_{mm})^2} \right) = 0, \quad (3.64)$$

et

$$\left(\frac{\partial D_1}{\partial x_m^*} - A \frac{\partial U_1}{\partial x_m^*} \right)_{(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})} \equiv \sum_n M_{mn}(E_m^{(0)}) x_n^{(0)} = 0. \quad (3.65)$$

L'ensemble $(E_m^{(0)}, x_m^{(0)} A^{-1/2})$ est donc bien une solution de (3.44), (3.45), pourvu que A soit positif c'est-à-dire que $E_m^{(0)}$ soit plus grand que $|Y_m| - V_{mm}$ pour au moins une valeur de m .

4.3.- Les valeurs relatives de $\langle 0|H|0 \rangle$ aux divers points stationnaires.

Dans l'espace des variables (E_m) , $\langle 0|H|0 \rangle$ est égal à $U(E_m^{(0)})$ en un point stationnaire $(E_m^{(0)})$. Il suffit donc de comparer les valeurs correspondantes de U . On démontre facilement (appendice A) l'énoncé suivant :

Si $(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})$ est une solution des équations (3.44), (3.45) et si $M(E_m^{(1)})$ est positive définie, alors

$$U(E_m^{(0)}) > U(E_m^{(1)}), \quad (3.66)$$

et si $M(E_m^{(1)})$ est positive semi-définie

$$U(E_m^{(0)}) \geq U(E_m^{(1)}); \quad (3.67)$$

l'égalité peut avoir lieu si et seulement si

$$E_m^{(0)} \equiv E_m^{(1)} \quad \text{quel que soit } m. \quad (3.68)$$

D'où les conséquences suivantes :

S'il y a une solution $(E_m^{(0)}, x_m^{(0)})$ des équations (3.44), (3.45) telle que $M(E_m^{(0)})$ soit positive semi-définie,

- i)- $U(E_m^{(0)})$ est la valeur maximum de $U(E_m)$ quand le point (E_m) varie dans le domaine où $M(E_m)$ est positive semi-définie ;
- ii)- cette valeur de U est le minimum absolu unique de $(0|H|0)$, car si ce minimum est atteint par une autre solution $(E_m^{(1)}, x_m^{(1)})$, on a nécessairement $E_m^{(1)} \equiv E_m^{(0)}$ quel que soit m , bien que les solutions en x_m puissent être différentes.

4.4.- Maximum de la fonction U dans la région où la matrice est positive semi-définie.

La région où M est positive semi-définie est entièrement incluse dans la région définie par les inégalités

$$E_m \geq -V_{mm} \quad , \text{ pour tous } m, \quad (3.69)$$

et dans laquelle la fonction continue $U(E_m)$ (équation (3.52)) est bornée supérieurement par $\sum_m (\xi_m - |\zeta_m|)$. D'autre part,

U tends vers $-\infty$ quand une des valeurs E_m au moins devient infinie. Donc la région où M est positive semi-définie (dénotée par $M \geq 0$) possède, à distance finie de l'origine, au moins un point $(E_m^{(0)})$ où $U(E_m)$ atteint son maximum. Maintenant nous démontrons qu'on peut choisir au moins un ensemble $(\chi_m^{(0)})$ tel que $(E_m^{(0)}, \chi_m^{(0)})$ soit une solution des équations (3.44), (3.45).

Nous ferons les remarques suivantes :

1°.- Ce point maximum $(E_m^{(0)})$ est tel que

$$E_m \geq |\zeta_m| - V_{mm} \quad \text{quel que soit } m, \quad (3.70)$$

car sinon il y aurait au moins une valeur de m , soit m_0 pour laquelle

$$E_{m_0}^{(0)} < |\zeta_{m_0}| - V_{m_0 m_0}$$

Posons par définition $E_{m_0}^{(1)} = |\zeta_{m_0}| - V_{m_0 m_0}$ et $E_m^{(1)} = E_m^{(0)}$ pour toutes les valeurs de m autres que m_0 . Alors $U(E_m^{(1)})$ serait plus grande que $U(E_m^{(0)})$, et $M(E_m^{(1)})$ resterait positive semi-définie ; $U(E_m^{(0)})$ ne serait donc pas la valeur maximum de $U(E_m)$ dans la région où M est positive semi-définie ce qui contredit l'hypothèse que $(E_m^{(0)})$ est le point maximum de U

2°.- On peut supposer d'autre part que $E_m^{(0)}$ soit

supérieur à $|\xi_m| - V_{mm}$ pour au moins une valeur de m , soit m_0 . Car si l'on avait $E_m^{(0)} = |\xi_m| - V_{mm}$ pour tout m , alors $M(|\xi_m| - V_{mm})$ serait positive semi-définie et d'après un critère de Bogoliubov ⁽⁵⁰⁾ les équations (3.44) (3.45) n'auraient que la solution triviale qui maximise U et minimise $\langle 0|H|0 \rangle$

3°.- Ce point maximum $E_m^{(0)}$ est nécessairement sur la frontière définie comme la partie de la surface $D(E_m) = 0$ qui limite la région $M(E_m) \geq 0$ (positive semi-définie). En effet, si $D(E_m^{(0)})$ était différent de zéro, toutes les valeurs propres de $M(E_m^{(0)})$ seraient positives et en diminuant un peu la coordonnée $E_{m_0}^{(0)}$ pour m_0 quelconque, on resterait dans la région $M(E_m) \geq 0$ ce qui permettrait d'augmenter la valeur de U .

4.5.- Existence d'une solution $(E_m^{(0)}, \chi_m^{(0)})$ des équations (3.44), (3.45) où $U(E_m^{(0)})$ est la valeur maximum de U dans la région $M \geq 0$.

Pour cette démonstration on peut encore supposer que $E_m^{(0)} > -V_{mm}$, quel que soit m . En effet, si $E_{m_i}^{(0)} = V_{m_i m_i}$ (ce qui implique que $\xi_{m_i} = 0$), le caractère positif semi-défini de M entraîne que

$$V_{m_i n} = V_{n m_i}^* = 0, \text{ quel que soit } n. \quad (3.71)$$

Pour ces états m_i , les équations (3.44), (3.45) sont vérifiées

avec $E_{m_i} = E_{m_i}^{(0)}$ et n'importe quels χ_{m_i} . La quantité $\langle 0|H|0 \rangle$ ne dépend pas de la transformation faite sur ces états là. Une fois mis à part ces états m_i , à la fois dans la fonction U et dans la matrice M , le problème d'existence à démontrer reste le même.

1°.- Soit $(E_m^{(0)})$ un point régulier de la surface $D(E_m) = 0$ (figure 3.4). Alors les équations qui déterminent $(E_m^{(0)})$, le point maximum de U avec la restriction $D = 0$, s'obtiennent par la méthode de Lagrange. Ces dernières équations expriment en fait que les surfaces $D = 0$ et $U = C = U(E_m^{(0)})$ sont tangentes au point $(E_m^{(0)})$.

Le résultat de la section 4.2 (1°) nous assure de l'existence d'un ensemble $(\chi_m^{(0)})$ tel que $(E_m^{(0)}, \chi_m^{(0)})$ vérifie les équations (3.44), (3.45). Cette solution est unique à une phase triviale près

$$\begin{aligned} \chi_m^{(0)} &\longrightarrow \chi_m^{(0)} e^{2i\theta} \\ \alpha_m &\longrightarrow e^{iN\theta} \alpha_m e^{-iN\theta} \end{aligned} \quad (3.72)$$

qui ne change ni les valeurs moyennes dans le vide $|0\rangle$ des quantités telles que H , qui commutent avec N , ni les contributions des diagrammes connexes intervenant ensuite dans le calcul de l'énergie du fondamental.

2°.- Soit $(E_m^{(0)})$, un point singulier de la surface

$D = 0$ (fig. 3.5). Afin d'utiliser le résultat de la section 4.2 (2°), nous démontrons maintenant que dans l'espace des variables (E_m, χ_m) la surface $D_1(E_m, \chi_m) = 0$ (équation (3.60)) et le cylindre $U_1(E_m, \chi_m) = C = U(E_m^{(0)})$ (équation (3.61)) sont tangents en un point $(E_m^{(0)}, \chi_m^{(0)})$.

Considérons le plan

$$\Pi(E_m) \equiv \sum_m (E_m - E_m^{(0)}) \left(1 - \frac{\chi_m^2}{(E_m^{(0)} + V_{mm})^2} \right) = 0 \quad (3.73)$$

tangent au cylindre $U_1(E_m, \chi_m) = U(E_m^{(0)})$ le long de la génératrice $E_m = E_m^{(0)}$, et les deux plans voisins (figure 3.5) :

$$\Pi_{\pm}(E_m) \equiv \Pi(E_m) \pm \varepsilon = 0, \quad \varepsilon > 0. \quad (3.74)$$

Il existe un voisinage de $(E_m^{(0)})$ tel que $M(E_m) > 0$, et qui ne contient aucun point de l'interaction du plan $\Pi_- = 0$ et $D_1 = 0$ (avec les coordonnées χ_m non-nulles). Par contre, le plan $\Pi_+ = 0$ n'a pas une telle propriété. Si l'intersection de $\Pi = 0$ avec

$D_1 = 0$ n'avait aucun point singulier (les χ_m n'étant pas tous nuls), alors les intersections de $\Pi_{\pm} = 0$ et $D_1 = 0$ seraient symétriques pour ε assez petit. Comme ce n'est pas le cas, on peut conclure qu'il existe au moins un point singulier $E_m = E_m^{(0)}$ et des $\chi_m^{(0)}$ non-nuls, sur l'intersection de $\Pi = 0$ avec $D_1 = 0$. C'est, par conséquent, le point de contact cherché de $D_1 = 0$ avec $U_1 = U(E_m^{(0)})$. La constante A dans l'équation (3.64) est

positive (section 4.4 - remarque 2°).

Si $(E_m^{(0)})$ est un point singulier d'ordre λ de la surface $D = 0$, il semble qu'on ait λ solutions distinctes $(\alpha_m^{(1)})$, $(\alpha_m^{(2)})$, ..., $(\alpha_m^{(\lambda)})$ linéairement indépendantes qui donnent le même $\langle 0|H|0 \rangle$, mis à part l'arbitraire des phases (l'équation 3.72 plus haut). Par exemple, pour un système de trois paires avec les éléments de la matrice d'interaction V_{mn} réels, $D = 0$ possède un point singulier d'ordre 2 qui peut, dans certains cas être le maximum de U (figure 3.5). Alors les équations (3.44), (3.45) n'ont pas de solution avec les α_m réels ; mais elles ont deux solutions distinctes (déterminées à une phase triviale près), qui sont les complexes conjugués l'une de l'autre.

5.- La matrice t après transformation canonique sur les opérateurs de paires.

Une fois résolues les équations (3.44) et (3.45) qui spécifient la transformation canonique et rendent $\langle 0|H|0 \rangle$ minimum, on écrit l'hamiltonien sous la forme

$$\begin{aligned}
 H &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \\
 &= \langle 0|H|0 \rangle + \sum_m E_m (\alpha_m^\dagger \alpha_m + \alpha_{-m}^\dagger \alpha_{-m}) + \mathcal{H}_1 \quad (3.75)
 \end{aligned}$$

où \mathcal{H}_1 est la perturbation écrite sous la forme du produit

normal suivant :

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{m,n} 2V_{mn} : a_m^+ a_{-m}^+ a_{-n} a_n :$$

Comme dans la théorie de Goldstone habituelle, on développe l'énergie de liaison du fondamental de H en puissances de \mathcal{H}_1 et l'on représente les divers termes par les diagrammes vide-vide connexes (section 3). C'est-à-dire

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + & \langle 0 | \mathcal{H}_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - \mathcal{H}_0} \mathcal{H}_1 | 0 \rangle_c + \langle 0 | \mathcal{H}_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - \mathcal{H}_0} \mathcal{H}_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - \mathcal{H}_0} \mathcal{H}_1 | 0 \rangle_c \\ & + \dots \end{aligned} \quad (3.76)$$

avec

$$\mathcal{E}_0 = \langle 0 | \mathcal{H}_0 | 0 \rangle = \langle 0 | H | 0 \rangle. \quad (3.77)$$

les contractions à l'intérieur de \mathcal{H}_1 n'étant pas admises.

Suivant notre programme de regrouper les termes qui ont le même comportement par rapport à la densité quand celle-ci devient faible, nous définissons une matrice t par la somme des échelles montantes (figure 3.6). Cette matrice t vérifie donc l'équation intégrale

$$t_{mn}(\Delta E) = V_{mn} + \sum_p \frac{2V_{mp} |u_p|^4}{-(2E_p + \Delta E)} t_{pn}(\Delta E), \quad (3.78)$$

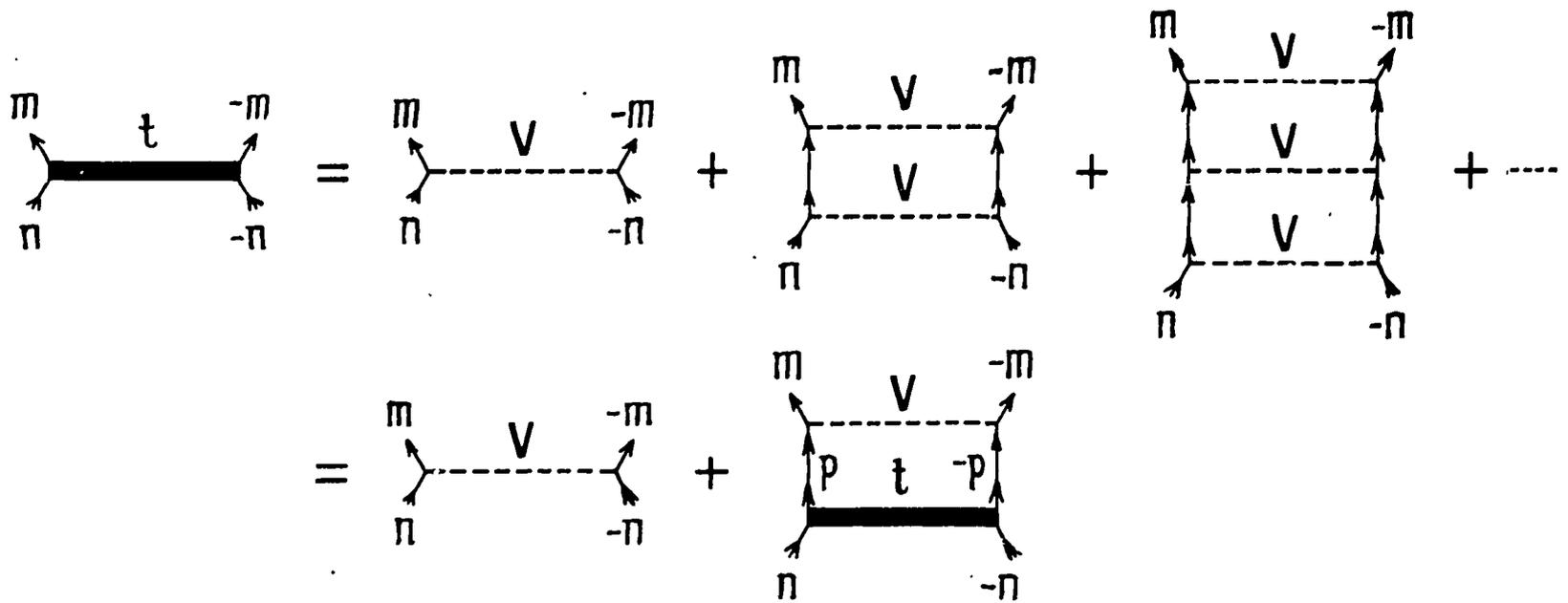


Fig- 3-6

Représentation graphique de la matrice t après la transformation canonique des paires.

ou sous une forme légèrement différente :

$$\sum_p \left\{ (E_m + \frac{1}{2}\Delta E) \delta_{mp} + V_{mp} |u_p|^4 \right\} \frac{t_{pn}(\Delta E)}{2E_p + \Delta E} = \frac{1}{2} V_{mn}. \quad (3.79)$$

L'énergie d'excitation ΔE du reste du diagramme est supposée positive ou nulle. En particulier, la contribution des échelles montantes à l'énergie du fondamental de H , qui domine à basse densité, est donnée par

$$\sum_m \left\{ t(2E_m) - V_{mm} \right\} |v_m|^4. \quad (3.80)$$

Il est facile à voir que la matrice t de l'équation (3.79) n'a aucune singularité pour $\Delta E > 0$, si la transformation a été choisie de façon à réaliser le minimum absolu de $\langle 0|H|0 \rangle$, pourvu que tous les E_m soient positifs ou nuls. De fait ces singularités correspondent aux valeurs de ΔE telles que la matrice qui intervient comme coefficient dans l'équation (3.79) soit singulière. Son déterminant doit donc être nul :

$$\det \left[(E_m + \frac{1}{2}\Delta E) \delta_{mn} + V_{mn} |u_n|^4 \right] \equiv \det [M'_{mn}] = 0,$$

où

$$M'_{mn} = (E_m + \frac{1}{2}\Delta E) \delta_{mn} + V_{mn} |u_m|^2 |u_n|^2.$$

D'autre part, pour un ensemble quelconque de variables ξ_m , l'expression suivante

$$\sum_{m,n} \xi_m^* M'_{mn} \xi_n = \sum_{m,n} (\xi_m |u_m|^2)^* M_{mn} (\xi_n |u_n|^2) + \frac{1}{2} \Delta E \sum_m |\xi_m|^2 + 2 \sum_m E_m |\xi_m|^2 (1 - |u_m|^2)$$

est positive pour $\Delta E > 0$, si tous les E_m sont positifs ou nuls et si la matrice M est positive semi-définie (section 4 plus haut). La matrice M' est donc positive définie et son déterminant ne peut pas être nul.

6.- Succès et limitations de la méthode variationnelle utilisant la transformation de paires.

Dans le cas d'une interaction entre paires de moment total nul, nous avons pris comme fonction d'essai le vide des quasi-particules α . La transformation canonique de paires qui définit les α est déterminée par la stationnarité de la valeur moyenne de $\langle 0 | H | 0 \rangle$. On a pris comme hamiltonien non-perturbé \mathcal{H}_0 la partie quadratique en α et α^\dagger de l'hamiltonien complet et la différence $\mathcal{H}_1 = H - \mathcal{H}_0$ comme perturbation. Ensuite, on a sommé les échelles montantes pour rendre compte des termes dominants à basse densité.

Il peut arriver qu'il y ait plusieurs transformations qui correspondent aux divers points stationnaires ; la bonne transformation à choisir est celle qui donne l'énergie moyenne la plus basse. On a démontré l'existence d'au moins une transformation qui donne un minimum absolu unique de $\langle 0|H|0 \rangle$ et un spectre unique des énergies d'excitation E_m , telle qu'une certaine matrice M soit positive semi-définie.

De plus, si les E_m sont tous positifs, le regroupement des termes de même comportement en fonction du volume à basse densité, nous conduit à une matrice \hat{t} non-singulière.

Pourtant les E_m ne sont restreints que par l'inégalité

$$E_m \geq |S_m| - V_{mm}$$

et donc si l'interaction est répulsive avec des éléments diagonaux importants, les énergies E_m pourront être négatives pour certaines valeurs de m , et les développements (3.76) et (3.80) n'auront pas de sens. Par exemple, pour une interaction purement répulsive au voisinage de la surface de Fermi ($T_m = 0$), la transformation triviale (3.47) minimise $\langle 0|H|0 \rangle$, et certaines valeurs E_m sont négatives. On peut se heurter aussi à la même difficulté dans la théorie habituelle de Goldstone, quand on effectue la somme partielle des boucles passives.

D'autre part, on ne peut évidemment pas calculer

$$\langle 0|\alpha_m H \alpha_m^\dagger|0 \rangle$$

pour l'hamiltonien complet H , car cela n'a pas de sens si l'interaction est singulière (coeur dur). Selon toute vraisemblance, les interactions nucléaires comportent une répulsion singulière à courte portée et une attraction plus faible à longue portée. Pour traiter de telles interactions, nous reprenons la notion des potentiels self-consistants dans le chapitre suivant .

CHAPITRE IV

APPROXIMATION DES BASSES DENSITÉS

1.- Définition des champs self-consistants.

Nous voulons choisir les champs w_k et W_k de façon à tenir compte des termes dominants dans la limite de basse densité, de telle sorte que les divergences usuelles de la méthode de Brueckner soient éliminées. Les effets de H_1 seront donc "petits" et pourront être considérés comme des perturbations.

A basse densité, la région dans laquelle Z_k est négatif, et donc $|v_k|$ appréciable, est en gros limitée à l'intérieur de la mer de Fermi. La région où $W_k \sim u_k v_k$ est important, c'est-à-dire où u_k et v_k sont simultanément non-négligeables est le voisinage de la surface de Fermi. Ces deux régions sont petites par rapport à la région où Z_k est positif et l'interaction appréciable.

Dans la limite de la densité nulle, les termes dominants sont alors ceux qui contiennent le minimum de facteurs $|v_k|^2$ et $u_k v_k$ ou W_k . L'importance relative de ces facteurs n'est pas connue à priori. Cependant, après la sommation sur la variable k , on peut espérer que la contribution due à $|v_k|^2$ qui garde un signe constant sera plus importante que

celle de $u_k v_{-k}$ qui change de signe.

Suivant Bogoliubov ⁽¹⁴⁾, nous compensons donc le champ W_k par une contraction anormale à l'intérieur de V et suivant Brueckner ⁽⁸⁾, nous compensons ω_k par une échelle montante. Autrement dit, nous écrivons les équations pour les champs ω_k et W_k en compensant leurs contributions par celles des termes les plus importants à basse densité. Ces termes sont associés aux diagrammes contenant le minimum de flèches dirigées vers le bas, et parmi eux, à ceux contenant le maximum de facteurs $|v_k|^2$. Graphiquement, ces conditions sont exprimées sur les figures 4.1 et 4.2. Soit en termes algébriques : *

$$\omega_k = \sum_{k_1} \left\{ (k k_1 | t | k k_1) - (k k_1 | t | k, k) \right\} |v_{k_1}|^2 \quad (4.1)$$

et

$$W_k = \sum_{k_1} (k, -k | V | k_1, -k_1) u_{-k_1} v_{k_1} \quad (4.2)$$

* On pourrait penser obtenir de meilleurs résultats en remplaçant (4.2) soit par

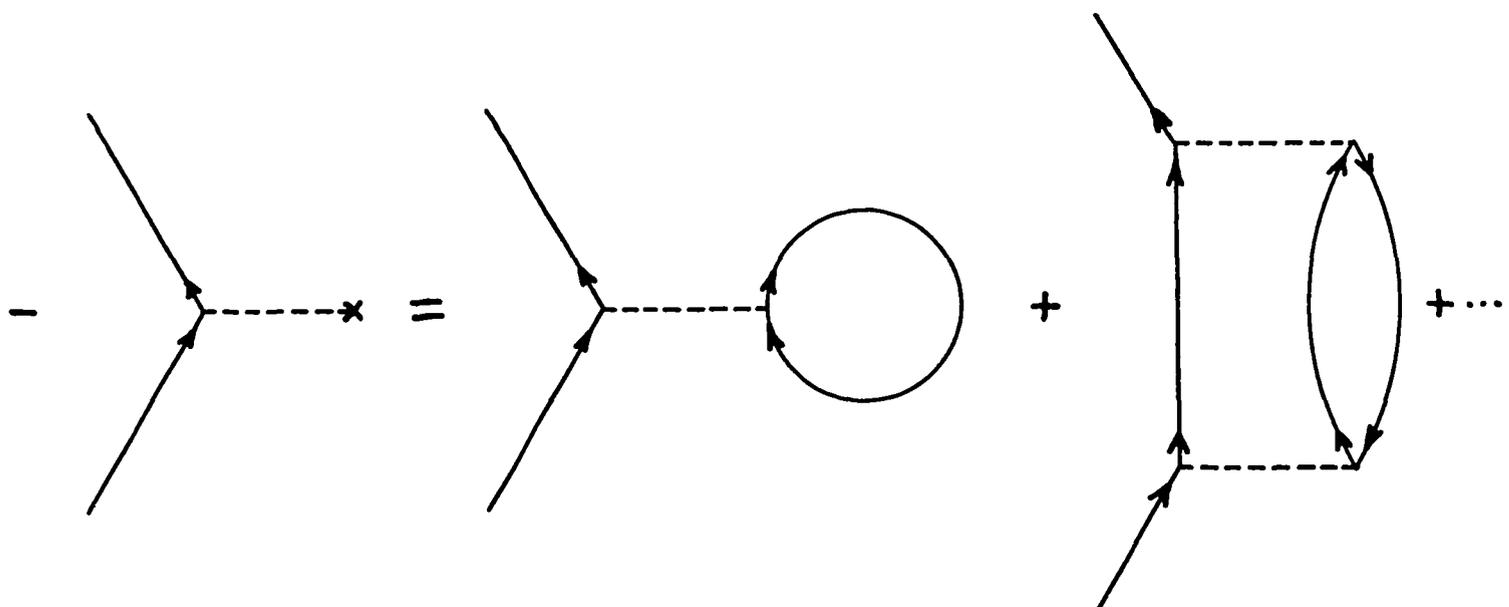
$$W_k = \sum (k | t | k_1) u_{-k_1} v_{k_1} \quad (4.3)$$

soit par

$$W_k = \sum (k | t | k_1) u_{-k_1} v_{k_1} + \sum \frac{(k | t | k_1) W_{k_1} |u_{k_1}|^4}{2E_{k_1} + \delta E} \quad (4.4)$$

avec

$$(k | t | k') = (k, -k | V | k', -k') + \sum_1 \frac{(k, -k | V | k_1, -k_1) (k_1 | t | k') |u_{k_1}|^4}{-(2E_{k_1} + \delta E)} \quad (4.5)$$



+ les termes d'échanges

Fig. 4-1

La définition graphique du potentiel ω_k .

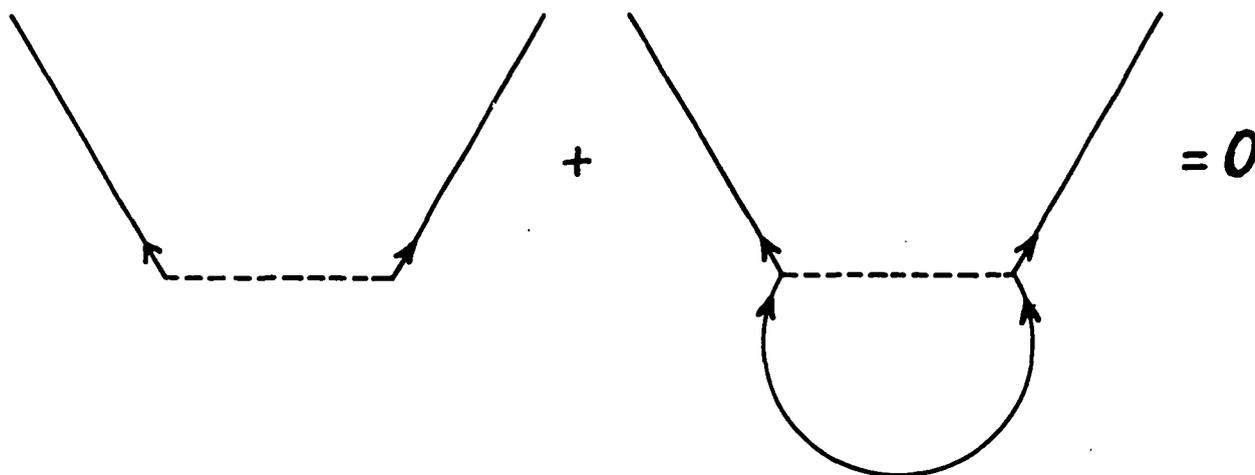


Fig. 4-2

La définition graphique du potentiel W_k .

où la matrice \mathfrak{t} vérifie l'équation intégrale

$$(1_2 | \mathfrak{t} | 3_4) = (1_2 | V | 3_4) + \sum_{5,6} \frac{(1_2 | V | 5_6) (5_6 | \mathfrak{t} | 3_4)}{-(E_5 + E_6 + \delta E)} |u_5|^2 |u_6|^2 \quad (4.6)$$

Cette définition assure la compensation approchée de toutes les interactions ω_k et W_k avec toutes les échelles montantes et les parties des types indiquées sur la figure 4.3 de tous les diagrammes (sauf ceux de la figure 4.4). La compensation est approchée parce que, dans la définition de la matrice \mathfrak{t} , nous n'avons tenu compte qu'approximativement de l'énergie d'excitation du reste du diagramme au niveau de l'interaction ω_k ou W_k . Cette difficulté est la même que celle de la théorie de Brueckner-Goldstone et comme les calculs numériques montrent que cette dépendance de l'énergie d'excitation n'est pas trop forte, on peut introduire une valeur moyenne δE dans le dénominateur de (4.6). Il n'en résultera pas de nouvelles difficultés si l'énergie d'excitation est toujours positive ou nulle (ce que nous supposons) ; les dénominateurs ne pourront jamais devenir arbitrairement petits.

Les équations (3.24), (3.9), (3.23), (4.1), (4.2) et (4.6) définissent complètement le problème self-consistant.

La contribution des diagrammes (4.4a) et (4.4b)

Mais il est facile de voir que l'équation (4.3) est inacceptable, car elle conduit à un résultat en désaccord avec celui de Bogoliubov asymptotiquement exact, dans le cas particulier d'un potentiel séparable entre paires d'impulsion totale nulle ; tandis que (4.4) est équivalent à (4.2) ce que nous montrons dans l'appendice B. ⁽⁴⁰⁾

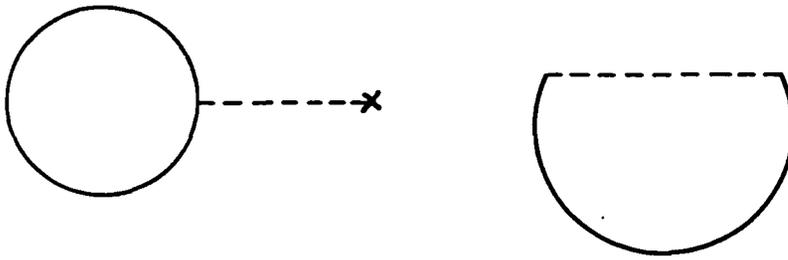


Fig. 4-3

Les parties correspondant aux boucles passives.

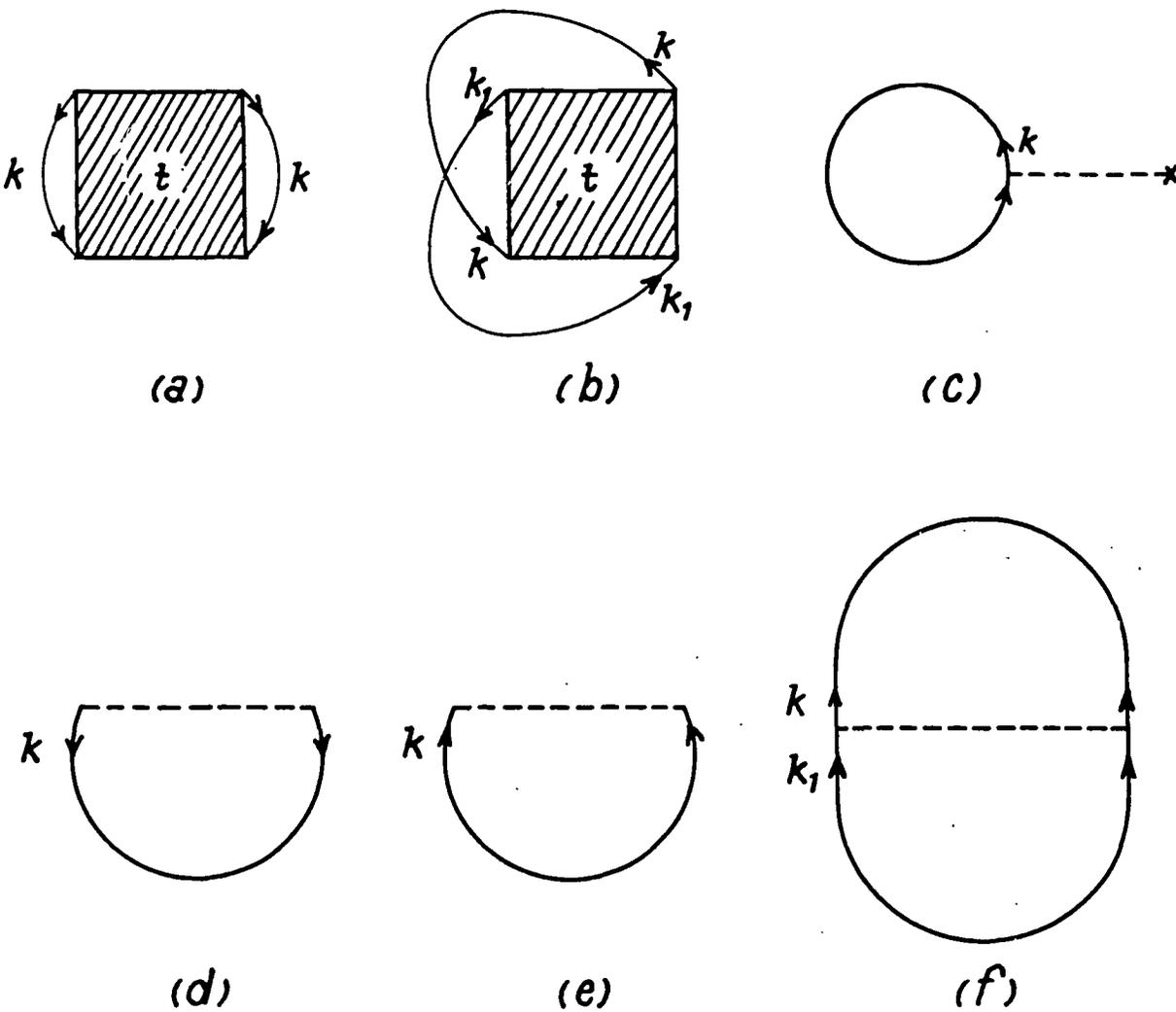


Fig. 4-4

Les diagrammes contribuant à l'énergie de liaison au premier ordre.

est

$$\frac{1}{2} \sum \left\{ (k, k_1 | t | k, k_1) - (k, k_1 | t | k_1, k) \right\} |v_k|^2 |v_{k_1}|^2 ; \quad (4.7)$$

celle de (4.4d) et (4.4e) est

$$-\frac{1}{2} \sum \left(W_k u_{-k}^* v_k^* + W_k^* u_{-k} v_k \right) ; \quad (4.8)$$

les contributions respectives de (4.4c) et (4.4f) sont

$$-\sum \omega_k |v_k|^2 , \quad (4.9)$$

et

$$\frac{1}{2} \sum (k, -k | V | k_1, -k_1) u_{-k}^* v_k^* u_{-k_1} v_{k_1} . \quad (4.10)$$

L'énergie de liaison de l'état fondamental est donc au premier ordre

$$\begin{aligned} U = U_0 + U_1 &= \sum \left\{ z_k |v_k|^2 + \frac{1}{2} \left(W_k u_{-k}^* v_k^* + W_k^* u_{-k} v_k \right) \right\} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum \left\{ \omega_k |v_k|^2 + \left(W_k u_{-k}^* v_k^* + W_k^* u_{-k} v_k \right) - W_k u_{-k}^* v_k^* \right\} \\ &= \sum \left\{ \left(T_k + \frac{1}{2} \omega_k \right) |v_k|^2 + \frac{1}{2} W_k u_{-k}^* v_k^* \right\} , \quad (4.11) \end{aligned}$$

où l'on a utilisé les relations (4.1) et (4.2) qui définissent les w_R et W_R .

2.- Représentation de l'interaction par une somme de termes séparables.

La théorie mathématique des équations intégrales fait appel à deux types de raisonnements reposant respectivement sur les méthodes d'approximations successives suivantes :

1°.- On divise l'intervalle d'intégration en n parties égales ou non, n étant fini ; on remplace ainsi d'une manière approchée l'équation intégrale par un système de n équations algébriques simultanées. Le comportement de la solution du système est étudié pour n tendant vers l'infini. La démonstration originale des théorèmes de Fredholm, par exemple, est basée sur cette méthode.

Dans notre cas cela revient à prendre un nombre q d'états, q étant fini, comme nous l'avons fait dans les sections 3.4, 3.5 et 3.6 plus haut, et à rechercher la limite de la solution du système quand q tend vers l'infini.

2°.- On prend comme approximation du noyau de l'équation intégrale, une série de Fourier tronquée

$$K(x, y) \cong \sum \phi_i(x) \psi_i(y)$$

n étant fini. Le système de n équations algébriques simultanées qui en résulte est résolu et l'on étudie le comportement de la solution dans la limite où n tend vers l'infini. Goursat a justifié la méthode lorsque certaines conditions de convergence sont vérifiées, et en employant cette méthode il a retrouvé les théorèmes de Fredholm.

Cela revient, dans notre cas, à développer toute interaction entre paires de particules d'impulsion totale K en une somme de termes séparables :

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}K + k, \frac{1}{2}K - k \mid V \mid \frac{1}{2}K + k', \frac{1}{2}K - k' \right) &= (k, -k \mid V \mid k', -k') \\ &\equiv V_{kk'} \approx \frac{1}{\Omega} \sum_{i=1}^n b_i t_i(k) t_i(k'), \end{aligned} \quad (4.12)$$

en supposant que les fonctions $t_i(k)$ forment une base complète. Et il faudrait, en principe, prendre la limite pour n tendant vers l'infini.

Si l'on ne garde qu'un petit nombre de termes, le problème devient mathématiquement très simple et on peut faire les calculs explicitement. Les cas physiques qu'on peut résoudre exactement étant très limités, il est intéressant de faire des modèles, même s'il ne représentent pas exactement la réalité.

A cause de leur simplicité mathématique, ces interactions, sommes de termes séparables, ont été proposées par Wigner et étudiées pour la première fois en détail par Yamaguchi et Yamuguchi⁽⁵¹⁾. Plusieurs auteurs⁽⁵²⁾ les ont utilisées depuis dans les cas simples où tous les b_i sauf un

(ou quelquefois deux) sont nuls.

2.1.- L'interaction séparable.

En particulier, on a considéré dans les théories récentes de la superconductivité ^(13,14) le cas où un seul terme b_1 est non-nul. L'interaction est alors exclusivement soit répulsive, soit attractive, et l'on a suivant le signe de b_1 ($\neq 0$), une transformation triviale ou non, mais toujours unique, qui rend minimum $\langle 0|H|0\rangle$. Si le potentiel s'écrit

$$V_{kk'} = \frac{b}{\Omega} f(k) f(k') \quad (4.13)$$

on doit donc distinguer les deux cas suivants :

- i)- $b > 0$, alors $W_k = 0$,
- ii)- $b < 0$, alors $W_k = g f(k)$, où la constante g est donnée par l'équation

$$1 = \frac{b}{2\Omega} \sum_k \frac{f^2(k)}{\sqrt{z_k^2 + g^2 f^2(k)}} \quad (4.14)$$

Bogoliubov ⁽⁴⁰⁾ n'a pas tenu compte de ω_k dans cette équation et il a montré d'une façon rigoureuse que le minimum unique

de $\langle 0|H_0\rangle$ ainsi obtenu tend asymptotiquement vers l'énergie exacte du fondamental de H quand le volume du système augmente indéfiniment.

2.2.- L'interaction doublement séparable.

Le cas d'une interaction doublement séparable, c'est-à-dire où deux termes de (4.12) b_1 et b_2 sont seuls non-nuls, est un peu plus réaliste puisque les deux paramètres nous permettent de décrire qualitativement à la fois l'attraction à longue portée et la répulsion à courte portée. Le modèle d'une couche dure, utilisée par divers auteurs, en particulier par Monsieur De Dominicis ⁽¹⁸⁾, s'obtient en posant $b_1 = \infty$. Par exemple $t_1(k) = a \frac{\sin ka}{k}$, où a est le rayon de la couche dure, rend compte de l'onde S , et la fonction d'onde de spin assure l'antisymétrisation.

Il est instructif de considérer plus en détail le cas :

$$b_1 = b > 0, \quad b_2 = -\mu < 0, \quad b_3 = b_4 = \dots = 0.$$

L'équation (4.2) s'écrit alors

$$\begin{aligned} W_k &= b t_1(k) \frac{1}{\Omega} \sum_{k'} t_1(k') u_{-k'} v_{k'} - \mu t_2(k) \frac{1}{\Omega} \sum_{k'} t_2(k') u_{-k'} v_{k'} \\ &= A t_1(k) - \mu B t_2(k), \end{aligned} \quad (4.15)$$

où

$$A = \frac{b}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} t_1(\mathbf{k}) u_{-\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \quad ,$$

$$B = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} t_2(\mathbf{k}) u_{-\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \quad . \quad (4.16)$$

En utilisant les relations (3.22) et (3.24), on obtient

$$A = -\frac{b}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{t_1(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} \left\{ A t_1(\mathbf{k}) - \mu B t_2(\mathbf{k}) \right\} ,$$

$$B = -\frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{t_2(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} \left\{ A t_1(\mathbf{k}) - \mu B t_2(\mathbf{k}) \right\} ; \quad (4.17)$$

ou encore si A et B ne sont pas identiquement nuls

$$\frac{A}{\mu B} = \frac{F_{12}}{F_{11} + \frac{1}{b}} = \frac{F_{22} - \frac{1}{\mu}}{F_{12}} \quad , \quad (4.18)$$

avec

$$F_{ij} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{t_i(\mathbf{k}) t_j(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} \quad . \quad (4.19)$$

Des relations (4.18) on peut déduire la condition nécessaire

pour que le minimum de $\langle 0|H|0\rangle$ ait lieu pour une transformation non-triviale. En fait, après quelques manipulations l'équation (4.18) nous donne*

$$\left\{ \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{t_1(\mathbf{k})h(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} + \frac{t_2(\mathbf{k}_F)}{b} \right\}^2 = (F_{11} + \frac{1}{b}) \left\{ \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{h^2(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} + \frac{t_2^2(\mathbf{k}_F)}{b} - \frac{t_1^2(\mathbf{k}_F)}{\mu} \right\}, \quad (4.20)$$

où nous avons posé

$$h(\mathbf{k}) = t_1(\mathbf{k})t_2(\mathbf{k}_F) - t_2(\mathbf{k})t_1(\mathbf{k}_F) \quad (4.21)$$

l'impulsion \mathbf{k}_F étant définie par l'égalité $Z_{\mathbf{k}_F} = 0$. On voit sur la relation (4.20), que pour avoir une transformation canonique non-triviale, μ doit être assez grand pour rendre positive l'expression

$$\frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{h^2(\mathbf{k})}{|Z_{\mathbf{k}}|} + \frac{t_2^2(\mathbf{k}_F)}{b} - \frac{t_1^2(\mathbf{k}_F)}{\mu}. \quad (4.22)$$

* Je suis reconnaissant à Monsieur R. BALIAN de m'avoir indiqué cette façon d'établir la condition nécessaire.

On peut aussi établir le caractère nécessaire et suffisant de la condition (4.22) à partir d'un critère énoncé par Bogoliubov que l'on trouve en référence (50).

Il rest à vérifier maintenant que la matrice t définie par l'équation (4.6) n'a aucune singularité. En substituant l'interaction doublement séparable (et $(k_1, k_2 | V | k_3, k_4) = 0$ si $k_1 + k_2 \neq 0$) on voit que la matrice en question est de la forme

$$(k - k' | t | k' - k) \equiv (k | t | k') = t_1(k) g_1(k') - \mu t_2(k) g_2(k') \quad (4.23)$$

où g_1 et g_2 vérifient les équations

$$\begin{aligned} (F'_{11} + \frac{1}{b}) g_1(k) - \mu F'_{12} g_2(k) &= t_1(k) \\ F'_{12} g_1(k) + (1 - \mu F'_{22}) g_2(k) &= t_2(k) \end{aligned} \quad (4.24)$$

avec

$$F'_{ij} = \frac{1}{\Omega} \sum_k \frac{t_i(k) t_j(k)}{2E_k + \delta E} |u_k|^4$$

Pour que ces équations aient une solution non singulière, il faut et il suffit que la quantité suivante

$$(F'_{11} + \frac{1}{b})(1 - \mu F'_{22}) + \mu F'^2_{12} \quad (4.25)$$

soit non-nulle. En fait, elle toujours positive, parce que

$$\frac{F'_{11} + \frac{1}{b}}{\frac{1}{b} F'_{22} + F'_{11} F'_{22} - F'^2_{12}} > \frac{F_{11} + \frac{1}{b}}{\frac{1}{b} F_{22} + F_{11} F_{22} - F^2_{12}} = \mu \quad (4.26)$$

(voir l'appendice C et l'équation (4.18)),

$$F'_{22} > 0 ,$$

et

$$(F'_{11} F'_{22} - F'^2_{12}) = \frac{1}{2} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{|u_{\mathbf{k}}|^4}{2E_{\mathbf{k}} + \delta E} \times \frac{|u_{\mathbf{k}'}|^4}{2E_{\mathbf{k}'} + \delta E} \times \left\{ t_1(\mathbf{k}) t_2(\mathbf{k}') - t_1(\mathbf{k}') t_2(\mathbf{k}) \right\}^2 > 0.$$

La formulation ci-dessus est bien adaptée au cas d'une couche dure $b = +\infty$. Les quantités A et $g_i(\mathbf{k})$ restent finies, la condition (4.22) et les autres équations ci-dessus conservent un sens.

On peut dire en résumé que pour une interaction doublement séparable, dont une partie est répulsive, même infinie, et l'autre attractive, les équations de la transformation canonique ont une solution unique qui est non-triviale si et seulement si la partie attractive dépasse un certain seuil. Une fois cette transformation effectuée, on peut définir une matrice \mathbf{t} non singulière, unique qui regroupe tous les termes ayant le

même comportement en fonction du volume ; la contribution de tous les termes dominants à basse densité à l'énergie de l'état fondamental de H est comprise dans le terme du premier ordre en t .

3.- La régularité de la matrice t pour une interaction générale.

Les éléments $(rs|V|mn)$ de la matrice de l'interaction sont indépendants de l'impulsion totale de la paire, sauf la restriction évidente qu'elle doit être conservée. On peut alors adopter la méthode utilisée dans le cas de l'impulsion totale nulle (Chapitre III, Section 5) pour démontrer la régularité de la matrice t construite en resumant les termes de la série des perturbations associés aux diagrammes en échelles montantes (équation (4.6)), pourvu que les hypothèses suivantes soient vérifiées.

1°.- L'énergie E_k d'excitation d'une quasi-particule considérée comme fonction de l'impulsion continue k est convexe c'est-à-dire que

$$E_{\frac{1}{2}K+k} + E_{\frac{1}{2}K-k} = E_{k+\frac{1}{2}K} + E_{k-\frac{1}{2}K} \geq 2 E_k$$

quelle que soit l'impulsion totale K .

2°.- L'énergie E_k est partout positive.

La première de ces hypothèses est vérifiée dans tous

les cas étudiés en détail jusqu'à présent. Elle exprime que les énergies de particules indépendantes sont telles qu'on ne puisse pas diminuer l'énergie totale d'une paire de particules ayant une impulsion relative donnée et une impulsion totale nulle, en leur donnant une vitesse d'ensemble supplémentaire. Pour des particules libres l'énergie du mouvement du centre de masse s'ajoute simplement à l'énergie du mouvement relatif et la propriété devient évidente. Pour une interaction ayant une valeur constante négative dans le voisinage de la surface de Fermi et nulle en dehors de ce voisinage, on a un gap ^(13,14) dans le spectre des excitations à une particule

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\hbar^2 k^2 - \hbar^2 k_F^2)^2 + \Delta^2}$$

et l'hypothèse de la convexité de $E_{\mathbf{k}}$ reste encore vérifiée.

La situation n'est pas aussi claire en ce qui concerne la deuxième hypothèse. Loin de la surface de Fermi, les $E_{\mathbf{k}}$ sont certainement toujours positifs. Si on considère les transformations canoniques linéaires en général, et si on cherche à minimiser l'énergie moyenne $\langle H \rangle$ du système, il peut arriver que la transformation donnant ce minimum soit une transformation qui mélange tous les $a_{\mathbf{k}}$ et $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ sans respecter la conservation de l'impulsion, c'est-à-dire que les quasi-particules obtenues n'auront pas une impulsion bien déterminée. Ceci résulte de la propriété plus générale que même si un hamiltonien commute avec une suite d'opérateurs, il n'est pas nécessaire que la fonction d'onde qui le minimise à l'intérieur d'un certain ensemble de fonctions d'essai soit une fonction propre de ces opérateurs.

Ainsi l'hamiltonien décrivant un noyau est invariant par rapport aux rotations, mais l'état fondamental donné par la théorie de Hartree-Fock pour un noyau ayant une couche incomplète peut posséder une déformation permanente ⁽⁵³⁾. L'hamiltonien décrivant les mouvements des électrons dans les métaux commute avec l'opérateur du nombre total des électrons, mais l'état fondamental de la théorie de Bardeen, Cooper et Schrieffer pour ce système qui est l'état superconducteur, n'a pas un nombre bien défini d'électrons ^(13,14). On peut multiplier ces exemples, et on voit qu'il n'y a aucune raison mathématique pour que le minimum de $\langle H \rangle$ soit obtenu avec une transformation conservant les impulsions. Bien que l'on puisse imaginer des situations hypothétiques contraires ⁽⁵⁴⁾, on peut espérer que cela ne se produise pas dans les cas physiques.

Il existe toujours une transformation canonique linéaire du type général telle que le nouveau vide soit un état à une particule $\alpha_k^+ | \rangle$. Donc si la valeur moyenne de H est minimum par rapport aux états du vide correspondant à la transformation canonique générale pour l'état $| \rangle$, elle sera forcément supérieure pour l'état $\alpha_k^+ | \rangle$:

$$\langle | \alpha_k H \alpha_k^+ | \rangle > \langle | H | \rangle$$

ce qui montre que la minimisation de $\langle H \rangle$ avec une transformation canonique linéaire générale rend toujours positives les énergies d'excitation élémentaires.

Dans le cas des systèmes finis, l'existence des noyaux

déformés montre clairement qu'il existe des cas réels où le minimum n'est pas atteint pour une transformation du type spécial. Dans le cas de la matière nucléaire infinie, Overhauser⁽⁵⁵⁾ a suggéré l'existence possible d'un phénomène semblable, se traduisant par des oscillations de la densité (qui est constante dans le cas des transformations spéciales). Overhauser, cependant, n'avait pas tenu compte de la formation des paires de Bardeen, Cooper et Schrieffer ordinaires. Une étude tenant compte de ces effets⁽⁵⁶⁾ a montré que le gain en énergie de liaison de la fonction d'onde de Bardeen, Cooper et Schrieffer est toujours supérieur à celui que donne la fonction d'onde d'Overhauser sauf peut-être dans le cas purement académique d'un système à une dimension. On peut donc dire qu'il n'y a actuellement aucun fait montrant l'existence de cas où le minimum pour un système infini serait atteint pour une transformation qui ne soit pas du type spécial. Il n'y a malheureusement non plus aucune démonstration que cela ne puisse pas se produire pour certaines interactions.

CHAPITRE V

COMPARAISON NUMÉRIQUE DE LA MATRICE t DE BRUECKNER
AVEC CELLE OBTENUE APRÈS LA TRANSFORMATION CANONIQUE

En utilisant les résultats analytiques du chapitre précédent, on peut calculer la matrice t après la transformation canonique. Il est intéressant de la comparer avec la matrice \bar{t} de Brueckner. Nous ferons cette comparaison pour le cas d'une interaction séparable.

Nous avons pris l'interaction séparable de Yamaguchi et Yamaguchi, qui est en accord avec l'énergie de liaison du deutéron et les déphasages de la diffusion nucléon-nucléon à basse énergie:

$$V_{kk'} = -\frac{\hbar^2}{M} \frac{\lambda}{\Omega} \bar{t}_k \bar{t}_{k'}$$

où

$$\bar{t}_k = \frac{1}{k^2 + \beta^2}$$

et les paramètres sont donnés par

$$\lambda = 8\pi\beta(\alpha + \beta)^2,$$

$$\alpha = 0.2316 \times 10^{13} \text{ cm}^{-1},$$

et

$$\beta = 1.4488 \times 10^{13} \text{ cm}^{-1}.$$

La matrice \hat{t} s'écrit alors, avec ou sans transformation canonique sous la forme :

$$t_{kk'} = -\frac{k^2}{M} \frac{\lambda}{\Omega} t_k t_{k'} \{N(k')\}^{-1}$$

Pour la matrice \hat{t} ordinaire de Brueckner on a,

$$\begin{aligned} N_{Br}(k') &= 1 - \frac{\lambda}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{k}| \geq k_F} d\vec{k} \frac{t_k^2}{k^2 - k'^2} \\ &= 1 - \frac{2}{\pi} \left(\frac{\alpha + \beta}{\beta(1+x'^2)} \right)^2 \left\{ -x' \log \frac{a_F - x'}{a_F + x'} + \right. \\ &\quad \left. + (1-x'^2) \left(\frac{\pi}{2} - \arctan a_F \right) - (1+x'^2) \frac{a_F}{1+a_F^2} \right\} \end{aligned}$$

où on a introduit les variables sans dimension :

$$x' = \frac{k'}{\beta} < a_F = \frac{k_F}{\beta}$$

tandis que pour la matrice \hat{t} après la transformation canonique, la fonction N est donnée par

$$N_{T_r}(k') = 1 - \frac{4}{\pi} \left(\frac{\alpha + \beta}{\beta} \right)^2 \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{1+x^2} \frac{|u_x|^4}{\sqrt{(x^2 - a_F^2)^2 (1+x^2)^2 + c^2 + (1+x^2)\Phi(k)}}$$

où l'étalement de la surface de Fermi est décrit par la fonction $|u_x|^2$ suivante :

$$|u_x|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{(1+x^2)(x^2 - a_F^2)}{\sqrt{(x^2 - a_F^2)^2 (1+x^2)^2 + c^2}} \right)$$

La constante C est déterminée par l'équation

$$1 = \frac{4}{\pi} \left(\frac{\alpha + \beta}{\beta} \right)^2 \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{1+x^2} \frac{1}{\sqrt{(x^2 - a_F^2)^2 (1+x^2)^2 + c^2}}$$

La fonction $\Phi(k')$ s'exprime au moyen de la variable réduite x'

par

$$\varphi(k') = \frac{1}{1+x'^2} \sqrt{(x'^2 - a_F^2)^2 (1+x'^2)^2 + c^2}$$

Les fonctions $N_{Br}(x')$ et $N_{Tr}(x')$ ont été calculées par intégration numérique et leurs inverses sont représentées sur la figure 5.1. La fonction $|u_x|^2$ (figure 5.2) donne une idée de l'étalement de la surface de Fermi.

Comme on le savait, $1/N_{Br}(x')$ devient infini pour une valeur de x' légèrement inférieure à a_F . On remarque que bien que le pôle de la matrice t soit extrêmement voisin de la surface de Fermi (énergie de liaison de la paire de Cooper extrêmement faible) son effet sur la matrice est cependant très important pratiquement dans tout l'intérieur de la sphère de Fermi. L'effet de régularisation de la transformation canonique se traduit alors par une très grande différence entre la matrice non régularisée et la matrice régularisée. On voit même que la matrice t régularisée diffère assez peu du potentiel lui-même.

Pour les éléments de matrice de t correspondant aux paires d'impulsion totale non nulle, la géométrie rend les calculs beaucoup plus compliqués. Dans une toute première approximation on peut tenir compte de l'impulsion totale K de la paire en remplaçant k'^2 par $k'^2 - \frac{1}{2}K^2$. On voit alors que le pôle de la matrice t de Brueckner sort du domaine d'intégration lorsque K^2 devient de l'ordre de grandeur de l'énergie de liaison de la paire de Cooper. Dans l'exemple considéré, cette

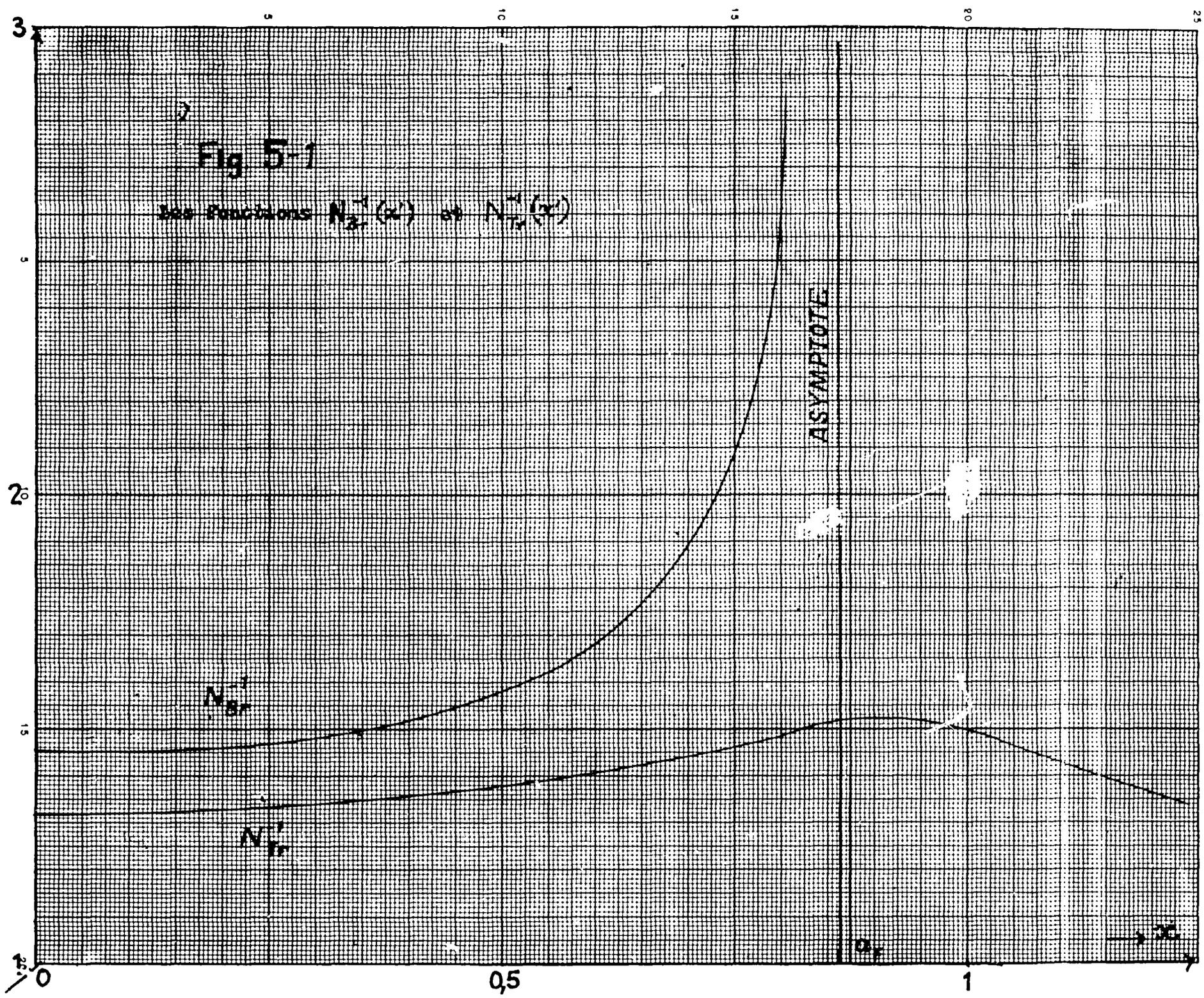


Fig 5-1

see functions $N_{B'}^1(x)$ or $N_{Y'}^1(x)$

$N_{B'}^1$

$N_{Y'}^1$

ASYMPTOTE

0.5

1

3.0

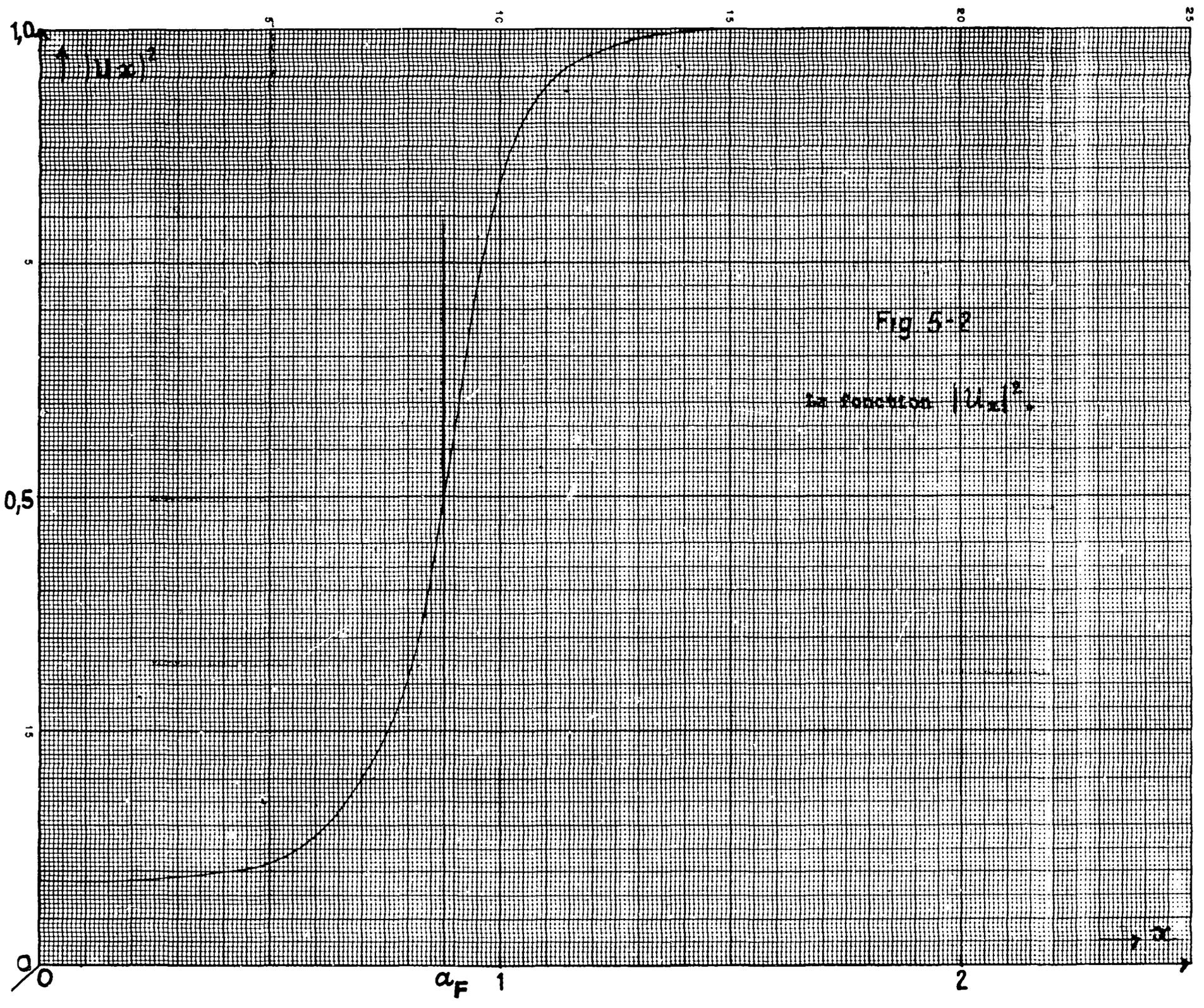


Fig. 5-2

function $|U(x)|^2$

a_F

0

0,5

10

1

2

x

valeur est très petite, mais on peut s'attendre à ce que l'influence du pôle se fasse sentir dans un domaine beaucoup plus grand de valeurs de K .

REMERCIEMENTS

Cette thèse rassemble certains des travaux que j'ai effectués au cours des trois dernières années au Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay. Mon séjour à Saclay a été rendu possible grâce à l'hospitalité du Commissariat à l'Energie Atomique, à une Bourse de Broglie accordée également par le Commissariat à l'Energie Atomique, à une Bourse du Service de Coopération Technique, à une Bourse de voyage du Gouvernement Indien et à un congé accordé par le Tata Institute of Fundamental Research à Bombay. Je suis tout particulièrement reconnaissant à ces Institutions pour leur générosité.

Je remercie très vivement Monsieur C. BLOCH, qui a bien voulu m'initier au problème à N corps. Les conseils, les encouragements, les critiques et les contributions qu'il a apportés m'ont été toujours très précieux. Je me suis servi des résultats d'une publication commune avec Monsieur R. BALIAN, que je tiens à remercier. Je remercie aussi tous mes autres camarades qui m'ont appris une langue qui n'était ni chantée à côté de mon berceau, ni parlée dans mon école ou mon lycée.

Monsieur F. PERRIN, Haut-Commissaire à l'Energie Atomique et Madame BENOIST, Maître de Conférence à la Faculté des Sciences ont bien voulu patroner cette thèse. Je les remercie également pour tout l'intérêt qu'ils ont pris à ce travail.

Mademoiselle JAMEUX s'est chargée de dactylographier ce texte. Je la remercie du dévouement qu'elle a apporté à cette tâche.

APPENDICE A

Soit $(E_m^{(0)}, \alpha_m^{(0)})$ une solution des équations (3.44), (3.45) :

$$\sum_n \{E_m^{(0)} \delta_{mn} + V_{mn}\} \alpha_n^{(0)} = 0 \quad (\text{A.1})$$

et

$$E (E_m^{(0)} + V_{mm}) \sqrt{1 - |\alpha_m^{(0)}|^2} = |\zeta_m| \quad (\text{A.2})$$

D'autre part

$$U(E_m^{(0)}) - U(E_m^{(1)}) = \frac{1}{2} \sum_m (E_m^{(1)} - E_m^{(0)}) \left\{ 1 - \frac{E_m^{(0)} + V_{mm}}{E_m^{(1)} + V_{mm}} \times \frac{\zeta_m^2}{(E_m^{(0)} + V_{mm})^2} \right\}$$

ce qui donne, en utilisant les équations (A.1) et (A.2) :

$$\begin{aligned} U(E_m^{(0)}) - U(E_m^{(1)}) &= \frac{1}{2} \sum_m \frac{(E_m^{(1)} - E_m^{(0)})^2 (1 - |\alpha_m^{(0)}|^2)}{(E_m^{(1)} + V_{mm})} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{m,n} M_{mn}(E_m^{(1)}) \alpha_m^{(0)*} \alpha_n \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Si la matrice $M(E_m^{(1)})$ est positive définie, ses éléments diagonaux $E_m^{(1)} + V_{mm}$ sont aussi positifs et l'équation (A.3) entraîne l'équation (3.66).

Si la matrice $M(E_m^{(1)})$ est positive semi-définie, l'équation (A.3) entraîne l'équation (3.67) ; l'égalité n'ayant lieu que si

$$\frac{(E_m^{(1)} - E_m^{(0)})^2 (1 - |\alpha_m^{(0)}|^2)}{E_m^{(1)} + V_{mm}} = 0, \quad \text{pour tout } m, \quad (\text{A.4})$$

et que si $(\alpha_m^{(0)})$ est une fonction propre de $M(E_m^{(1)})$:

$$\sum_n (E_m^{(1)} \delta_{mn} + V_{mn}) \alpha_n^{(0)} = 0. \quad (\text{A.5})$$

Les équations (A.1) et (A.5) donnent

$$(E_m^{(1)} - E_m^{(0)}) |\alpha_m^{(0)}|^2 = 0, \quad \text{pour tout } m. \quad (\text{A.6})$$

Les équations (A.4) et (A.6) impliquent que

$$E_m^{(1)} = E_m^{(0)}, \quad \text{pour tout } m.$$

APPENDICE B

L'EQUIVALENCE DES EQUATIONS (4.2) ET (4.4)

En remplaçant $(k|t|k')$ dans la première somme du deuxième membre de (4.4) par sa définition (4.5), on peut écrire l'équation (4.4)

$$\left(W_k - \sum_{k'} V_{kk'} u_{-k'} v_{k'} \right) + \sum_I \left(W_{k_I} - \sum_{k'} V_{k_I k'} u_{-k'} v_{k'} \right) \frac{(k|t|k_I) |u_{k_I}|^4}{2E_{k_I} + \delta E} = 0,$$

avec

$$V_{kk'} = (k, -k | V | k', -k');$$

ce qui montre bien que l'équation (4.2) entraîne (4.4). La réciproque est un peu plus compliquée à démontrer. Supposons que $V_{kk'}$ est une somme de N fonctions séparables :

$$V_{kk'} = \frac{1}{\Omega} \sum_{i=1}^n b_i t_i(k) t_i(k') \quad (\text{B.1})$$

Avec l'équation (4.5) on voit que $(k|t'|k')$ est de la forme

$$(k|t'|k') = \frac{1}{\Omega} \sum_{i=1}^n t_i(k) t_i(k') \quad (\text{B.2})$$

où les $t_i(k)$ vérifient les équations simultanées :

$$\sum_{j=1}^n G_{ij} t_j(k) = t_i(k) \quad (\text{B.3})$$

avec

$$G_{ij} = \frac{1}{b_i} \delta_{ij} + \frac{1}{\Omega} \sum_k \frac{t_i(k) t_j(k)}{2E_k + \delta E} |u_k|^4. \quad (\text{B.4})$$

D'autre part, en substituant $-\frac{W_k}{2E_k}$ pour $u_{-k} v_k$ (équations (3.9), (3.22) et (3.24)), on peut écrire l'équation (4.4) sous la forme :

$$W_k = \sum_{i=1}^n t_i(k) g_i, \quad (\text{B.5})$$

où les g_i vérifient les équations simultanées :

$$\sum_{j=1}^n P_{ij} g_j = 0, \quad (\text{B.6})$$

avec

$$P_{ij} = \delta_{ij} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} t_i(\mathbf{k}) t_j(\mathbf{k}) \left(\frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{|u_{\mathbf{k}}|^4}{2E_{\mathbf{k}} + \delta E} \right), \quad (\text{B.7})$$

tandis qu'avec la même forme de l'interaction, l'équation (4.2) s'écrit

$$W_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^n t_i(\mathbf{k}) g'_i, \quad (\text{B.8})$$

où

$$\sum_{j=1}^n Q_{ij} g'_j = 0, \quad (\text{B.9})$$

avec

$$Q_{ij} = \frac{1}{b_i} \delta_{ij} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{t_i(\mathbf{k}) t_j(\mathbf{k})}{2E_{\mathbf{k}}} \quad (\text{B.10})$$

Pour déduire (B.9) de (B.6), il suffit de voir que

$$\begin{aligned} \sum_{\ell} G_{i\ell} P_{\ell j} &= \sum_{\ell} G_{i\ell} \left\{ \delta_{\ell j} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} t_{\ell}(\mathbf{k}) t_j(\mathbf{k}) \left(\frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{|u_{\mathbf{k}}|^4}{2E_{\mathbf{k}} + \delta E} \right) \right\} \\ &= G_{ij} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} t_i(\mathbf{k}) t_j(\mathbf{k}) \left(\frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{|u_{\mathbf{k}}|^4}{2E_{\mathbf{k}} + \delta E} \right) \\ &= Q_{ij} \end{aligned}$$

Donc pour des interactions $V_{kk'}$ ayant la forme (B.1),
 n étant quelconque mais fini, l'équation (4.4) entraîne (4.2).

APPENDICE C

DEMONSTRATION DE L'EQUATION (4.26)

Avec les quantités F_{ij} et F'_{ij} définies dans le texte, on a évidemment

$$F_{ii} > 0 \ ; \quad F_{ii}F_{jj} - F_{ij}^2 > 0, \quad i \neq j, \quad (C.1)$$

$$F'_{ii} > 0 \ ; \quad F'_{ii}F'_{jj} - F'_{ij}^2 > 0, \quad i \neq j, \quad (C.2)$$

et aussi

$$F''_{ii} > 0 \ ; \quad F''_{ii}F''_{jj} - F''_{ij}^2 > 0, \quad i \neq j, \quad (C.3)$$

avec

$$F''_{ij} = F_{ij} - F'_{ij} \quad . \quad (C.4)$$

Pour démontrer que $\mu^2 > \mu$, ou que

$$\begin{aligned}
 & (1+bF_{11}') \{ F_{22} + b(F_{11}F_{22} - F_{12}^2) \} - (1+bF_{11}) \{ F_{22}' + b(F_{11}'F_{22}' - F_{12}'^2) \} \\
 &= b^2 \{ F_{11}'(F_{11}F_{22} - F_{12}^2) - F_{11}(F_{11}'F_{22}' - F_{12}'^2) \} + (F_{22} - F_{22}') \\
 & \quad + b(F_{11}'F_{22} - F_{11}F_{22}' + F_{11}F_{22} - F_{12}^2 - F_{11}'F_{22}' + F_{12}'^2) \\
 & > 0,
 \end{aligned}$$

il suffit de démontrer que

$$F_{11}'(F_{11}F_{22} - F_{12}^2) - F_{11}(F_{11}'F_{22}' - F_{12}'^2) > 0, \quad (C.5)$$

$$F_{22} - F_{22}' > 0, \quad (C.6)$$

et que l'on a au moins une des inégalités suivantes

$$F_{11}'F_{22} - F_{11}F_{22}' + (F_{11}F_{22} - F_{12}^2) - (F_{11}'F_{22}' - F_{12}'^2) > 0, \quad (C.7)$$

$$\begin{aligned}
 & 4(F_{22} - F_{22}') \{ F_{11}'(F_{11}F_{22} - F_{12}^2) - F_{11}(F_{11}'F_{22}' - F_{12}'^2) \} \\
 & - \{ F_{11}'F_{22} - F_{11}F_{22}' + (F_{11}F_{22} - F_{12}^2) - (F_{11}'F_{22}' - F_{12}'^2) \}^2 > 0. \quad (C.8)
 \end{aligned}$$

L'inégalité (C.6) est évidente. Pour montrer (C.5), remplaçons F_{ij} partout par $F'_{ij} + F''_{ij}$. On obtient :

$$\begin{aligned}
 & F'_{11} (F_{11} F_{22} - F_{12}^2) - F''_{11} (F'_{11} F'_{22} - F_{12}'^2) \\
 &= F'_{11} (F''_{11} F''_{22} - F_{12}''^2) + (F''_{22} F_{11}'^2 + F''_{11} F_{12}'^2 - 2 F_{12}' F_{12}'' F_{11}') \\
 &> F''_{22} F_{11}'^2 + F''_{11} F_{12}'^2 - 2 F_{11}' |F_{12}'| |F_{12}''| \\
 &= (F_{11}' \sqrt{F''_{22}} - |F_{12}'| \sqrt{F''_{11}})^2 + 2 |F_{12}'| (\sqrt{F''_{11} F''_{22}} - |F_{12}''|) \\
 &> 0.
 \end{aligned}$$

Maintenant il faut montrer qu'au moins une des deux inégalités (C.7) et (C.8) est vraie. Après quelques simplifications, le premier membre de (C.8) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 & 4 F''_{11} F''_{22} F_{12}'^2 - (F''_{11} F''_{22} - F_{12}'^2 + F_{12}''^2)^2 \\
 &= (\sqrt{F''_{11} F''_{22}} + |F_{12}'| + |F_{12}''|) \times (\sqrt{F''_{11} F''_{22}} + |F_{12}'| - |F_{12}''|) \times \\
 & \times \left\{ |F_{12}'| + |\sqrt{F''_{11} F''_{22}} - |F_{12}''|| \right\} \times \left\{ |F_{12}'| - |\sqrt{F''_{11} F''_{22}} - |F_{12}''|| \right\}.
 \end{aligned}$$

On voit que de ces quatre facteurs les trois premiers sont

positifs. En effet, pour le deuxième, on a

$$\begin{aligned}
 & \left(\sqrt{F''_{11} F''_{22}} + |F'_{12}| \right)^2 - |F''_{12}|^2 \\
 &= (F''_{11} F''_{22} - F''_{12}{}^2) + 2 \cdot |F'_{12}| \left(\sqrt{F''_{11} F''_{22}} - |F''_{12}| \right) \\
 & \quad + 2 \left(|F'_{12}| |F''_{12}| - F'_{12} F''_{12} \right) \\
 & > 0
 \end{aligned}$$

Donc si (C.8) n'était pas vérifiée, on aurait

$$F''_{11} F''_{22} + F'_{12}{}^2 - F''_{12}{}^2 > 2 |F'_{12}| \sqrt{F''_{11} F''_{22}} > 0$$

ce qui implique que (C.7) est vrai.

RÉFÉRENCES

- 1) Voir par exemple M.G. MAYER, J.H.D. JENSON Elementary Theory of Nuclear Shell Structure (John Wiley & Sons, 1955)
- 2) R. JASTROW Phys. Rev. 81 165. (1951)
L.J.B. GOLDFARB, D. FELDMAN Phys. Rev. 88 1099 (1952)
- 3) L.I. SCHIFF Phys. Rev. 84 1,11 (1951)
- 4) M. LEVY Phys. Rev. 88 725 (1952)
- 5) M.W. JOHNSON, E. TELLER Phys. Rev. 98 783 (1955)
- 6) H. EULER Zeit. fur Physik 105 553 (1937)
- 7) R. HUBY Proc. Roy. Soc. A62 62 (1949)
- 8) K.A. BRUECKNER, J.L. GAMMEL Phys. Rev. 109 1023 (1958)
Les références des articles antérieurs se trouvent dans cette publication. Voir aussi H.A. BETHE Phys. Rev. 103 1353 (1956)
- 9) J. GOLDSTONE Proc. Roy. Soc. A239 267 (1957)
- 10) N.M. HUGENHOLTZ Physica 23 481 (1957)

- 11) C. BLOCH Nucl. Phys. 4 451 (1958)
- 12) L.N. COOPER Phys. Rev. 104 1189 (1956)
- 13) J. BARDEEN, L.N. COOPER, J.R. SCHRIEFFER Phys. Rev. 108 1175 (1957)
- 14) N.N. BOGOLIUBOV, V.V. TOLMACHEV, D.V. SHIRKOV Une méthode nouvelle dans la théorie de superconductivité - Gostekhizdat SSSR (1958).
Les références antérieures de l'école soviétique se trouvent à la fin de ce livre.
J.G. VALATIN Nuovo Cimento 7 843 (1958)
- 15) L. VAN HOVE Physica 25 849 (1959)
Les autres références antérieures se trouvent dans cette publication.
- 16) N.M. HUGENHOLTZ Physica 23 533 (1957)
- 17) H.A. BETHE, J. GOLDSTONE Proc. Roy. Soc. A238 551 (1957)
- 18) C. DE DOMINICIS Thèse, Birmingham (1957)
- 19) Voir l'appendice II de la référence (14) ; aussi la référence (55)
- 20) Voir par exemple ,L.I. SCHIFF Quantum Mechanics (McGraw Hill, New-York, 1955) Chapitre 13

- 21) Voir par exemple P.M. MORSE, H. FESHBACH *Methods of Theoretical Physics* (McGraw Hill, New-York, 1953) Chapitre 9
- 22) R.P. FEYNMAN *Phys. Rev.* 76 749 (1949)
- 23) W.J. SWIATECKI *Phys. Rev.* 101 1321 (1956)
- 24) H.A. BETHE *Phys. Rev.* 103 1353 (1956)
- 25) L.C. GOMEZ, J.D. WALEKA et V.F. WEISSKOPF *Ann. Phys.* 3 241 (1958)
- 26) J.S. LEVINGER, M. RAZAVY, O. ROJO et N. WEBRE *Phys. Rev.* 119 230 (1960)
- 27) L.C. BIEDENHARN, J.M. BLATT et M.H. KALOS *Nucl. Phys.* 6 359 (1958)
- 28) W.J. SWIATECKI *Phys. Rev.* 103 265 (1956)
- 29) Il paraît que Wigner a discuté cette idée le premier *Phys. Rev.* 43 252 (1933)
- 30) E. FERMI *Ricerca Sci.* 7 13 (1936)
- 31) G. BREIT *Phys. Rev.* 71 215 (1947)
- 32) J.M. BLATT, V.F. WEISSKOPF *Theoretical Nuclear Physics* (John Wiley & Sons, 1952) Chapitre 3C page 74

- 33) K. HUANG, C.N. YANG Phys. Rev. 105 767 (1957)
 T.D. LEE, C.N. YANG Phys. Rev. 105 1119 (1957) ;
112 1419 (1958) ; 113 1406 (1959) ; 116 25 (1959) ;
117 12 (1960)
 T.D. LEE, K. HUANG, C.N. YANG Phys. Rev. 106 1135 (1957)
 K. HUANG Cours à'Eté de Physique Théorique aux Houches,
 (1958) ;
 Physica 26 S, 58 (1960)
- C.N. YANG Physica 26 S, 49 (1960)
 Voir aussi P.C. MARTIN, C. DE DOMINICIS Phys. Rev. 105
 1417 (1957)
- 34) C.N. YANG Physica 26 S,49 (1960)
- 35) T.D. LEE, C.N. YANG Phys. Rev. 105 1119 (1957)
- 36) K. HUANG Phys. Rev. 119 1129 (1960)
- 37) R. JASTROW Phys. Rev. 98 1479 (1955)
- 38) H. URSELL Proc. Camb. Phil. Soc. 23 685 (1927)
 J. YVON Act. Sc. Ind. 203 (1935)
 G. UHLENBECK, E. BETH Physica 3 729 (1936)
 J. MAYER J. Chem. Phys. 5 67 (1937)
 J. de BOER Rept. Progr. Phys. 12 305 (1948)
- 39) F. VILLARS Cours à l'Ecole d'Eté de Varenna (1961)
- 40) N.N. BOGOLIUBOV Physica 26 S,1 (1960)

- 41) N. FUKUDA Syposium sur le problème à N corps à Kyoto,
Novembre 1957
- 42) A. KLEIN, R. PRANGE Phys. Rev. 112 1008 (1958)
- 43) F. IWAMOTO Prog. Theor. Phys. 22 903 (1959)
- 44) J.S.R. CHISHOLM, E.J. SQUIRES Rapport de A.E.R.E. Harwell,
Octobre 1958 ; Nucl. Phys. 13 156 (1959)
- 45) M.L. MEHTA Nucl. Phys. 12 333 (1959)
- 46) J.S. BELL Proc. Phys. Soc. 73 118 (1959)
A. KATZ Ecole d'Eté de Physique de Naples (1960)
- 47) M.L. MEHTA Nucl. Phys. 20 533 (1960)
- 48) G.C. WICK Phys. Rev. 80 268 (1950)
- 49) R. BALIAN, M.L. MEHTA (à paraître)
- 50) N.N. BOGOLIUBOV Dok. Acad. Nauk SSSR 119 52 (1958)
(Traduction anglaise 3 279 (1958)
- 51) Y. YAMAGUCHI Phys. Rev. 95 1628 (1954)
Y. YAMAGUCHI et YAMAGUCHI Phys. Rev. 95 1635 (1954)
- 52) J. des CLOIZEAUX Thèse, Paris (1959)
C. DE DOMINICIS Référence (18)
C. DE DOMINICIS et P.C. MARTIN Phys. Rev. 105 1419 (1957)
M.K. SUNDERESAN Phys. Rev. 105 1075 (1957)

- 53) A. BOHR et B.R. MOTTELSON Math. Fys. Medd. 27 N°16 (1953)
S.G. NILSON Math. Fys. Medd. 30 N°1 (1955)
- 54) N.N. BOGOLIUBOV Dok. Acad. Nauk SSSR 119 244 (1958)
(traduction anglaise 3 292 (1958))
- 55) A.W. OVERHAUSER Phys. Rev. Letters 4 415, 462 (1960)
- 56) E.M. HENLEY et L.W. RUIJGROK Ann. Phys. 12 409 (1961)

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION	1
I.- LES METHODES GENERALES DE TRAITEMENT DES INTER- ACTIONS SINGULIERES.....	11
1.- La Théorie des perturbations.....	11
2.- Les termes dominants à basse densité.....	18
3.- L'équation de Bethe-Goldstone.....	23
4.- La méthode des pseudo-potentiels.....	24
5.- Les développements en fonction d'intégrales de "Cluster".....	25
6.- Une méthode d'élimination du potentiel singulier.	27
7.- Les états liés à deux fermions d'impulsions oppo- sées.....	28
II.- LES ECHELLES GENERALISEES. LES ESSAIS ANTERIEURS....	32
1.- Les échelles mixtes.....	32
2.- Les échelles généralisées.....	34
III.- LA TRANSFORMATION CANONIQUE DANS LE CAS DE L'INTER- ACTION DES PAIRES D'IMPULSION TOTALE NULLE	48

1.- La notion de quasi-particules.....	48
2.- Les potentiels self-consistants	49
3.- La théorie des perturbations.....	54
4.- L'interaction entre paires d'impulsion totale nulle.....	59
4.1.- Une représentation géométrique.....	65
4.2.- Existence d'une solution pour un point de contact des surfaces $D = 0$ et $U = C$, et réciproque.....	69
4.3.- Les valeurs relatives de l'énergie moyenne aux divers points stationnaires.....	73
4.4.- Maximum de U dans la région où la matrice M est positive semi-définie.....	74
4.5.- Existence d'une solution des équations de stationarité au maximum de U dans la région $M \geq 0$	76
5.- La matrice \mathcal{K} après transformation canonique sur les opérateurs de paires.....	79
6.- Succès et limitations de la méthode variation- nelle utilisant la transformation de paires....	83
IV.- APPROXIMATION DES BASSES DENSITES.....	86
1.- Définition des champs self-consistants.....	86
2.- Représentation de l'interaction par une somme de termes séparables.....	92

2.1.- L'interaction séparable.....	94
2.2.- L'interaction doublement séparable.....	95
3.- La régularité de la matrice τ pour une interaction générale	100
V.- COMPARAISON NUMERIQUE DE LA MATRICE τ DE BRUECKNER AVEC CELLE OBTENUE APRES LA TRANSFORMATION CANONIQUE.....	104
REMERCIEMENTS.....	111
APPENDICE A	112
APPENDICE B	114
APPENDICE C	118
REFERENCES	122

FIN