



ACADÉMIE
DES SCIENCES
INSTITUT DE FRANCE

Comptes Rendus

Physique

Yvan Castin

Fonctions de distribution de paires d'un gaz superfluide de fermions de spin 1/2 en interaction de contact dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée

Volume 27 (2026), p. 101-160

<https://doi.org/10.5802/crphys.276>



Cet article est publié sous la licence

CREATIVE COMMONS ATTRIBUTION 4.0 INTERNATIONAL.

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Les Comptes Rendus. Physique sont membres du
Centre Mersenne pour l'édition scientifique ouverte
www.centre-mersenne.org — e-ISSN : 1878-1535



Article de recherche

Fonctions de distribution de paires d'un gaz superfluide de fermions de spin 1/2 en interaction de contact dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée

Yvan Castin ^a

^a Laboratoire Kastler Brossel, ENS-Université PSL, CNRS, Université Sorbonne et Collège de France, 24 rue Lhomond, 75231 Paris, France
Courriel: yvan.castin@lkb.ens.fr

Résumé. Nous montrons que la théorie de champ moyen minimale à utiliser pour le calcul des fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ d'un gaz superfluide de fermions de spin 1/2 spatialement homogène non polarisé n'est pas la théorie BCS statique ordinaire, mais la théorie BCS dépendant du temps linéarisée, mise en œuvre par le truchement du théorème de fluctuation-dissipation. En effet, la première ignore totalement la branche d'excitation acoustique — les phonons — du superfluide, alors que la seconde en tient compte explicitement, ainsi que des fluctuations quantiques induites par le continuum de paires brisées. Contrairement à la première, la seconde théorie (i) répercute l'effet de ces excitations collectives sur l'équation d'état du système, y compris à température nulle, (ii) permet à la fonction $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de descendre à distance assez grande strictement en dessous de sa valeur asymptotique $(\rho/2)^2$ où ρ est la densité du gaz, comme il se doit d'après l'hydrodynamique quantique de Landau et Khalatnikov à basse température, et (iii) prédit dans la fonction $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à courte distance des contributions sous-dominantes en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ à 3D et en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \ln(-\ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ à 2D, à côté des contributions dominantes en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ à 3D et en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ à 2D déjà présentes dans la théorie BCS statique mais avec un coefficient plus faible. Cette discussion est pertinente pour les travaux théoriques récents d'Obeso-Jureidini et de Romero-Rochín, et pour les expériences en cours sur les gaz d'atomes froids à l'ENS et au MIT.

Mots-clés. Gaz de fermions, densité de paires, facteur de structure, théorème de fluctuation-dissipation, superfluidité, limite unitaire, interactions de contact.

Note. Une version multilingue est disponible en fichiers séparés sur l'archive ouverte HAL à l'adresse <https://hal.science/hal-05426463>.

Manuscrit reçu le 19 décembre 2025, révisé le 18 février 2026, accepté le 19 février 2026.

Table des matières

1. Introduction, motivations, insuffisance de la théorie BCS statique.....	102
2. Obtention des $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée.....	106
2.1. Interaction, état du système et brefs rappels sur la théorie BCS statique.....	106
2.2. L'obtention des $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dil}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en elle-même.....	111
2.3. Isoler la partie collective dans les $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dil}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$	113
2.4. Différentes formulations en termes d'intégrales curvilignes et applications.....	115
2.5. Quelle équation d'état dans notre théorie BCS dépendant du temps linéarisée?.....	119

3. Résultats explicites sur les $g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, numériques et analytiques	120
3.1. Comportement des $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à grande distance et basse température	121
3.1.1. Ce qu'on déduit de l'intégration par parties	121
3.1.2. Ce qu'on déduit d'une formulation par intégrale de contour	123
3.1.3. Ce qu'en dit l'hydrodynamique quantique	125
3.2. Résultats numériques	126
3.2.1. Cas tridimensionnel; comparaison au Monte-Carlo quantique de Giorgini	127
3.2.2. Cas bidimensionnel; comparaison aux expériences de l'ENS	130
3.3. Comportement des $g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à courte distance	131
3.3.1. Étude de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ pour $q \rightarrow +\infty$	132
3.3.2. Étude de $g_{\downarrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ pour $ \mathbf{r} - \mathbf{r}' \rightarrow 0^+$	134
3.3.3. Étude de $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ pour $ \mathbf{r} - \mathbf{r}' \rightarrow 0^+$	136
4. Conclusion générale	139
Déclaration d'intérêts	141
Annexe A. Développement à faible q de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$	141
A.1. Ce que donne le continuum de paire brisée	141
A.2. Ce que donne le phonon de Bogolioubov–Anderson	142
A.3. Applications : relations sommatoires	144
Annexe B. Développement à grand q de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$	146
B.1. Deux astuces simplificatrices et une table récapitulative	146
B.2. Cas bidimensionnel	149
B.3. Cas tridimensionnel	150
Annexe C. Comportement à courte distance de certaines intégrales de Fourier	155
C.1. Cas bidimensionnel	155
C.2. Cas tridimensionnel	157
Références	157

1. Introduction, motivations, insuffisance de la théorie BCS statique

Les fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ d'un gaz de fermions à deux états internes $\uparrow, \downarrow$ en interaction de contact, à l'équilibre thermique dans le cas spatialement homogène et non polarisé (même densité $\rho_\sigma = \rho/2$ dans chaque composante), définies comme

$$g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \rho_\sigma \rho_{\sigma'} + \delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \langle \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \rangle \quad (1)$$

où $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ est l'opérateur de champ fermionique pour le spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ et $\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sont les écarts aux valeurs asymptotiques, ont fait l'objet récemment d'études approfondies [1,2] en dimension $d = 2$ ou $d = 3$ à température nulle $T = 0$ au moyen de la théorie BCS ordinaire [3], dite *statique*, une théorie variationnelle réduisant l'état fondamental du gaz à un état cohérent de paires liées $\uparrow\downarrow$ (les équivalents pour notre gaz neutre des paires de Cooper des supraconducteurs, ici dans l'état singulet de spin). Nous nous proposons cependant, dans cet article, de souligner les insuffisances de cette théorie et d'en utiliser une meilleure, dite *dépendant du temps linéarisée*, pour le calcul des fonctions $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

En effet, la théorie BCS statique a le génie de tenir compte du phénomène de condensation par paires du gaz, de donner une borne variationnelle sur l'énergie et de prédire un spectre d'excitation $\epsilon_{\mathbf{k}}$ de quasi-particules fermioniques avec une bande interdite de largeur $E_{\text{gap}} > 0$, le fameux spectre BCS. Mais elle n'est pas adaptée à toutes les observables, en particulier à des observables aussi multimodes que $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. On le voit bien dans la limite CBE (Condensat de

Bose–Einstein) où l’on fait tendre vers zéro la densité ρ dans le cas où deux fermions $\uparrow$ et $\downarrow$ admettent un état lié dans le vide : la théorie BCS statique se réduit alors à un condensat pur de dimères bosoniques; or, dans un gaz de bosons condensé, un ansatz de condensat pur conduit à une fonction de distribution de paires $g_2^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ triviale, partout égale — après prise de la limite thermodynamique — à la densité ρ_B des bosons au carré, donc à un écart $\delta g_2^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à la valeur asymptotique ρ_B^2 identiquement nul. La théorie multimode de Bogolioubov [4], qui tient compte correctement de la fraction non condensée et des modes de quasi-particules bosoniques — dites justement quasi-particules de Bogolioubov — montre toutefois qu’il n’en est rien; en particulier, à température nulle, elle prédit que $\delta g_2^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ admet une queue en $-1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{d+1}$, et que l’intégrale de $\delta g_2^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}' = \mathbf{0})$ sur tout l’espace $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$ prend la valeur strictement négative $-\rho_B$, voir [5, section 8.7.2]. Rappelons l’adage : zéro est une mauvaise approximation pour toute quantité non nulle...

Mais étendons cette objection aux fermions dans le cas général. L’insuffisance de la théorie BCS statique, à température nulle ou pas, se voit bien sur la distribution de paires de fermions de spins opposés : comme l’ansatz variationnel est un état gaussien pour le champ fermionique, le théorème de Wick s’applique et l’on a

$$\delta g_{\downarrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |\langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}}|^2 \quad (2)$$

où « sta » mis en indice ou en exposant signifie « BCS statique ». Or, en appliquant le critère de Penrose et Onsager [6] à la matrice densité à deux corps $\langle \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma'_2}(\mathbf{r}'_2) \hat{\psi}_{\sigma'_1}(\mathbf{r}'_1) \rangle_{\text{sta}}$ dans le volume de quantification $[0, L]^d$ comme dans les références [7,8], c’est-à-dire en identifiant son

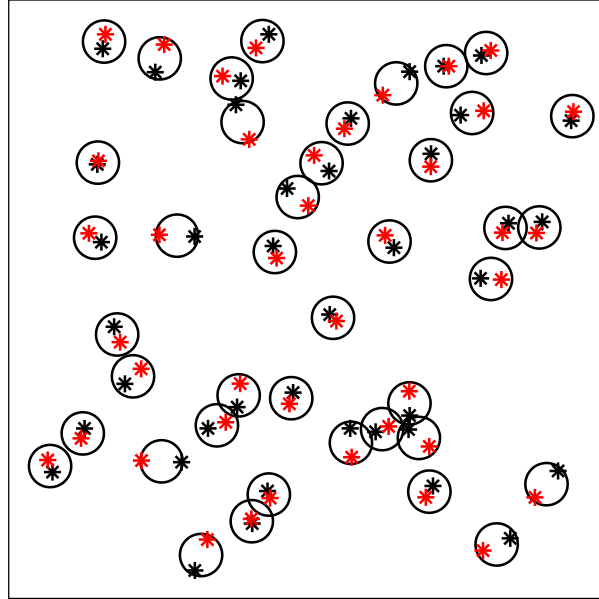


FIGURE 1. Représentation purement schématique de la distribution spatiale des fermions $\uparrow$ et $\downarrow$ dans un gaz 2D condensé par paires, dans un régime d’interaction intermédiaire — entre limite CBE et limite BCS — où la taille ℓ_{paire} d’une paire liée est plus faible mais du même ordre de grandeur que la distance moyenne $\rho^{-1/d}$ entre particules. Les fermions $\uparrow$ (étoiles noires) et $\downarrow$ (étoiles rouges) dans un même cercle appartiennent à la même paire liée (les cercles sont centrés sur les barycentres des paires liées). Comme le montre l’équation (4), la fonction de distribution $g_{\downarrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de la théorie BCS statique tient compte des corrélations spatiales entre deux fermions de spins opposés au sein d’une même paire liée, mais ignore celles entre deux paires liées différentes, car elle néglige les modes acoustiques du superfluide et les fluctuations de densité quantiques ou thermiques qu’ils induisent.

vecteur propre macroscopiquement peuplé — correctement normalisé à l'unité dans $[0, L]^{2d}$ — à la fonction d'onde $\phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ de paire liée $\uparrow\downarrow$ du condensat BCS, il vient¹

$$\phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}_1) \rangle_{\text{sta}} / (\bar{N}_0^{\text{paires}})^{1/2} \quad (3)$$

où

$$\bar{N}_0^{\text{paires}} = \int_{[0, L]^d} d^d r_1 \int_{[0, L]^d} d^d r_2 |\langle \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}_1) \rangle_{\text{sta}}|^2$$

est le nombre moyen de paires condensées, si bien que

$$\delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{N}_0^{\text{paires}} |\phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2. \quad (4)$$

La prédiction (2) décrit donc seulement la structure interne d'une paire liée $\uparrow\downarrow$ mais correspond à une distribution de paires liées plate, donc à une décorrélation complète entre les positions desdites paires, voir la figure 1 purement illustrative. Il en résulte qu'aux distances relatives $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \ell_{\text{paire}}$, où ℓ_{paire} est la taille d'une paire liée, la fonction $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ se réduit tristement au produit des densités $\rho_{\uparrow}^{\text{sta}} \rho_{\downarrow}^{\text{sta}}$ à un exponentiellement petit près, la moyenne anormale $\langle \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}}$ étant à décroissance rapide² pour la variable $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ [1,2]. En particulier, il saute aux yeux que $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est partout *supérieure* à sa valeur asymptotique.

¹ L'état fondamental du gaz dans la théorie BCS statique est un état cohérent de paires

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle \propto \exp\left[\int d^d r_1 d^d r_2 \alpha \phi_{\text{BCS}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}_2)\right] |0\rangle$$

où α est une amplitude complexe, $\phi_{\text{BCS}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est une fonction d'onde de paire normalisée — nous reprenons la notation des références [1,2] — et $|0\rangle$ est le vide de fermions. Il serait cependant incorrect d'assimiler ϕ_{BCS} à ϕ_0 . Ces fonctions ne sont pas proportionnelles; elles sont même bien distinctes, sauf dans la limite CBE où elles se réduisent à la fonction d'onde d'un dimère $\uparrow\downarrow$ d'impulsion nulle. Ce piège à éviter illustre les effets subtils de l'antisymétrisation fermionique.

² En dimension $d = 3$, nous trouvons à $T = 0$ que

$$\langle \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}} \stackrel{d=3}{\underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\sim}} -\frac{(m\Delta/\hbar^2)^{1/2}}{(2\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)^{3/2}} \text{Re}[ik_0^{1/2} \exp(-ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)]$$

avec $k_0 = [2m(\mu - i\Delta)/\hbar^2]^{1/2}$, μ le potentiel chimique du gaz, m la masse d'un fermion, $\Delta > 0$ le paramètre d'ordre écrit à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ (voir la section 2.1). Pour cela, nous effectuons l'intégrale angulaire dans l'expression (21) et utilisons la parité formelle en k de l'intégrande pour écrire le résultat sous la forme

$$\langle \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}} = [\Delta/(8i\pi^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)] \int_{-\infty}^{+\infty} dk k \exp(-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)/\epsilon_k.$$

La fonction $k \mapsto \epsilon_k$ prolongée analytiquement aux valeurs de k complexes admet dans chaque quadrant une ligne de coupure partant de k_0^* , $-k_0$, $-k_0^*$ ou k_0 et tendant vers l'infini suivant la bissectrice. Déformons alors comme dans [2] le chemin d'intégration en le rabattant dans le demi-plan inférieur sur les lignes de coupure issues de k_0 et $-k_0^*$, la contribution de la seconde étant le complexe conjugué de la première. Il reste à paramétrer la première comme suit,

$$\epsilon \in [0, +\infty[\mapsto k(\epsilon) = [2m(\mu - i\sqrt{\Delta^2 + \epsilon^2})/\hbar^2]^{1/2},$$

et à remarquer que $\epsilon_{k(\epsilon)}$ saute de $-i\epsilon$ à $+i\epsilon$ si l'on franchit la ligne de coupure de haut en bas (en effet, $\hbar^2 k(\epsilon) \frac{d}{d\epsilon} k(\epsilon)/m = -i\epsilon/\sqrt{\Delta^2 + \epsilon^2}$ donc $k(\epsilon + i\eta) - k(\epsilon) \sim i\eta \frac{d}{d\epsilon} k(\epsilon) \rightarrow 0^\pm$ et $\epsilon_{k(\epsilon+i\eta)} = [-(\epsilon + i\eta)^2]^{1/2} \rightarrow \mp i\epsilon$ si $\eta \rightarrow 0^\pm$), pour aboutir à

$$\langle \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}} \stackrel{d=3}{\underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\sim}} \frac{m\Delta}{2\pi^2\hbar^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \text{Im} \int_0^{+\infty} d\epsilon \frac{\exp[-ik(\epsilon)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|]}{(\Delta^2 + \epsilon^2)^{1/2}}.$$

Si $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty$, cette intégrale est dominée par l'intervalle $\epsilon = O(1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{1/2})$ donc par un voisinage du point de branchement k_0 ; il reste à développer $k(\epsilon)$ à l'ordre ϵ^2 sous l'exponentielle et à négliger ϵ sous la racine carrée au dénominateur de l'intégrande, pour obtenir — après intégration gaussienne — l'équivalent annoncé. La même procédure donne pour la moyenne normale (22) :

$$\langle \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle_{\text{sta}} \stackrel{d=3}{\underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\sim}} \frac{-m}{2\pi^2\hbar^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \text{Re} \int_0^{+\infty} d\epsilon e^{-ik(\epsilon)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\sim} -\frac{(m\Delta/\hbar^2)^{1/2}}{(2\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)^{3/2}} \text{Im}[ik_0^{1/2} \exp(-ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)].$$

En dimension $d = 2$, toujours à $T = 0$, nous utilisons les expressions analytiques (26) et (27) des moyennes normale et anormale établies dans la référence [1], le comportement asymptotique connu des fonctions de Bessel et la propriété spécifique à 2D que $k_0 \equiv [2m(\mu - i\Delta)/\hbar^2]^{1/2}$ s'écrit aussi $k_0 = k_{\text{F}}^{\text{sta}} - iq_{\text{dim}}$ avec les notations et les relations (25) de la

En réalité, dans les gaz de fermions en interaction à courte portée, il existe à basse température (ici à $T = 0$ pour simplifier) des excitations collectives bosoniques totalement ignorées par la théorie BCS statique. Elles correspondent à une branche d'excitation acoustique — par ondes sonores — isotrope dont le départ est linéaire en nombre d'onde,

$$\omega_{\mathbf{q}} \underset{q \rightarrow 0^+}{=} cq + O(q^3) \quad (5)$$

où c est la vitesse du son dans l'état fondamental du gaz. Les quanta associés sont donc des phonons de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et d'énergie $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ ($\omega_{\mathbf{q}}$ est la pulsation propre de l'onde sonore correspondante). Ils jouent le rôle, dans le cas des superfluides de fermions, des quasi-particules de Bogolioubov des gaz de bosons. Bogolioubov — encore lui — et Anderson, en contemporains avisés de Bardeen, Cooper et Schrieffer, avaient bien vu l'énorme lacune de la référence [3] et y avaient rapidement remédié [9,10] au moyen d'un formalisme assez lourd, celui de l'Approximation de la Phase Aléatoire (RPA) pour Anderson. D'où le nom de « Bogolioubov–Anderson » souvent accolé à cette branche acoustique et à ces phonons [11].

Il a été compris depuis que l'on peut obtenir la même relation de dispersion $q \mapsto \omega_{\mathbf{q}}$ plus simplement, en généralisant trivialement la théorie BCS au cas dépendant du temps (à $T = 0$, l'état cohérent est alors dans un mode spatial de paire $\uparrow\downarrow$ dépendant du temps) puis en la linéarisant autour de son état stationnaire, c'est-à-dire autour de la théorie BCS statique [12]. Une vérification et une comparaison soignée à la RPA ont notamment été faites dans la référence [13]. L'analogie avec les gaz de bosons devient évidente : la théorie BCS dépendant du temps est l'analogue de l'équation de Gross–Pitayevski dépendant du temps ; la linéarisation de la première reproduit le spectre d'excitation phononique de Bogolioubov–Anderson, tout comme la linéarisation de la seconde reproduit celui des quasi-particules de Bogolioubov. Dans les deux cas, une théorie de champ classique reproduit les pulsations propres d'une théorie de champ quantique.

Le point central est maintenant, le lecteur l'aura compris, que les amplitudes des modes de phonons — des ondes sonores dans le gaz — sont le siège de fluctuations thermiques et quantiques, ces dernières subsistant à $T = 0$ même s'il n'y a pas de phonons présents (une affirmation rendue tangible et quantitative par l'hydrodynamique quantique de Landau et Khalatnikov dans la section 3.1). Ceci entraîne inévitablement des fluctuations de la densité des paires liées par

section 2.1. Alors, après regroupement astucieux des deux moyennes en parties réelle et imaginaire d'une même quantité complexe (comme on pourrait le faire aussi à 3D), on trouve que

$$\langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}} + i \langle \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle_{\text{sta}} \underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\sim} - \frac{(m\Delta/\hbar^2)^{1/2}}{2\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \exp[i(\pi/4 - k_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)]$$

ce qui est compatible avec les équations (40) et (41) moins précises de la référence [1]. À température non nulle $T \neq 0$, cas non considéré dans les références [1,2], la fonction $k \mapsto 1/\epsilon_{\mathbf{k}}$ dans les intégrandes est remplacée par $k \mapsto (1 - 2f_{\mathbf{k}})/\epsilon_{\mathbf{k}} = \text{th}(\beta\epsilon_{\mathbf{k}}/2)/\epsilon_{\mathbf{k}}$ qui n'admet ni (i) ligne de coupure pour $k \in \mathbb{C}$ ni (ii) pôle pour k racine de l'équation $\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$. En effet, (i) $(\text{th } z)/z$ est une fonction paire de z , qui garde la même valeur à la traversée d'une ligne de coupure de $k \mapsto \epsilon_{\mathbf{k}}$ — on peut dire aussi que son développement en série entière ne comporte que des puissances paires de z , et (ii) $(\text{th } z)/z$ tend vers 1 lorsque $z \rightarrow 0$, c'est une fonction analytique de z sur un voisinage de l'origine. Ne restent donc comme singularités dans le plan complexe que les pôles thermiques fermioniques, tels que $\exp(\beta\epsilon_{\mathbf{k}}) = -1$; ceux du quadrant inférieur droit s'écrivent $k_n(T) = [2m(\mu - i|\Delta + i\pi(2n+1)k_B T|)/\hbar^2]^{1/2}$, $n \in \mathbb{N}$, les autres s'en déduisent par changement de signe global et conjugaison complexe. La formulation astucieuse par intégrale de contour en $d = 3$ s'applique toujours (le facteur thermique $f_{\mathbf{k}}$ ne change pas la parité formelle en k de l'intégrande et n'empêche pas de refermer le chemin d'intégration par un demi-cercle à l'infini dans le demi-plan inférieur). À grande distance, d'après le théorème des résidus, les moyennes anormale et normale sont dominées par les pôles les plus proches de l'axe réel, à savoir $k_0(T)$ et $-k_0^*(T)$; en suivant [5, section 8.7.3.2], en particulier pour le cas plus délicat $d = 2$, on obtient les comportements asymptotiques

$$\langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}} \left| 1 + i\pi \frac{k_B T}{\Delta} \right| + i \langle \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle_{\text{sta}} \underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\sim} - \frac{mk_B T/\hbar^2}{(\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)^{(d-1)/2}} \times \begin{cases} ie^{-ik_0(T)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} & \text{en } d = 3, \\ \left[\frac{2}{k_0(T)} \right]^{1/2} e^{i[\pi/4 - k_0(T)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|]} & \text{en } d = 2. \end{cases}$$

mise en mouvement de leur centre de masse donc l'apparition d'une structure non triviale dans $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ aux distances $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \ell_{\text{paire}}$. C'est cet effet qui conduit à l'existence des parties négatives de $\delta g_2^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, mentionnées plus haut, dans un gaz de bosons assez froid. Dans le cas des fermions, à suffisamment basse température, on doit donc s'attendre à perdre la propriété $\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \geq 0$ imprudemment déduite du théorème de Wick, puisque les paires liées $\uparrow\downarrow$ ressemblent à des bosons pour des phonons de grandes longueurs d'onde $\lambda_\phi \gg \ell_{\text{paire}}$. Pour enfoncer le clou, signalons qu'à $T = 0$, l'écart $\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, comme $\delta g_2^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, doit obéir à la limite thermodynamique à une relation sommatoire simple mais exacte, en l'occurrence

$$\int_{\mathbb{R}^d} d^d r \delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' = \mathbf{0}) \stackrel{T=0}{=} 0 \quad (6)$$

qui lui interdit — contrairement à (2) — d'être partout positif, voir pour plus de détails l'annexe A.3, qui montre en particulier le rôle joué par les phonons dans l'équation (6) et dans sa généralisation à $T > 0$.

La morale de cette histoire est que la théorie minimale acceptable pour le calcul des fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans un gaz de fermions de spin 1/2 en interaction de contact doit tenir compte de leur branche d'excitation acoustique $\omega_{\mathbf{q}}$. Ce ne peut être la théorie BCS statique, qui ne renferme que les excitations élémentaires de quasi-particules fermioniques $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Nous proposons ici comme candidat naturel son amélioration directe, la théorie BCS dépendant du temps linéarisée autour de sa solution stationnaire, qui garde la simplicité d'une théorie de champ moyen. Dans la suite, nous montrons comment obtenir les fonctions $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans cette théorie, en reliant fonctions de réponse et fonctions de corrélation densité-densité au travers du théorème de fluctuation-dissipation dans la section 2, puis nous analysons en détail les prédictions obtenues dans la section 3, en comparant aussi à des résultats numériques au-delà du champ moyen et à des mesures expérimentales dans des gaz d'atomes froids. Nous concluons dans la section 4.

2. Obtention des $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée

Dans cette section, nous mettons en place dans l'ensemble grand-canonique le formalisme BCS dépendant du temps linéarisé et ses fonctions de réponse densité-densité. Après la définition du problème et des rappels ciblés sur la théorie BCS statique dans la section 2.1, nous obtenons au moyen du théorème de fluctuation-dissipation dans la section 2.2 les écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ des fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à leurs valeurs asymptotiques sous forme d'intégrales des susceptibilités densité-densité $\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)$ sur le vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et l'énergie ϵ . Nous isolons dans la section 2.3 le noyau dur de la théorie, c'est-à-dire une correction commune $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)$ de ces susceptibilités à leurs approximations BCS statique, donc une correction commune sur les écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. L'intégrale de $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)$ sur ϵ admet dans la section 2.4 d'utiles réécritures en termes d'intégrales de contour dans le plan complexe, qui en facilitent l'évaluation numérique ou permettent de séparer les contributions du phonon de Bogolioubov–Anderson et du continuum de paire brisée. Enfin, nous montrons dans la section 2.5 que, lorsqu'on change les fonctions de corrélation de la densité par rapport à BCS statique comme nous le faisons ici, il faut aussi paradoxalement changer sa valeur moyenne, c'est-à-dire l'équation d'état grand-canonique du gaz, si l'on veut obtenir des valeurs sensées de $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à courte distance; ceci aboutit à une belle réécriture de la correction commune des fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à leurs approximations BCS statique $g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

2.1. Interaction, état du système et brefs rappels sur la théorie BCS statique

Nos fermions de spin 1/2 et de masse m vivent en dimension $d \in \{2, 3\}$ sans potentiel de piégeage mais avec des conditions aux limites périodiques dans la boîte de quantification $[0, L]^d$, dont on

fait tendre le volume L^d vers l'infini à la fin des calculs³. Ils n'interagissent pas lorsqu'ils sont dans le même état interne $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ (pas de résonance de diffusion dans l'onde p entre $\uparrow$ et $\uparrow$, ni entre $\downarrow$ et $\downarrow$) ; dans le cas contraire, ils interagissent par un potentiel de portée négligeable et de longueur de diffusion a_{dD} (résonance de diffusion dans l'onde s entre $\uparrow$ et $\downarrow$). Nous suivons la convention que l'état stationnaire de diffusion à deux corps $\uparrow\downarrow$ à énergie nulle s'écrit (en dehors du potentiel d'interaction)

$$\psi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \stackrel{d=3}{=} 1/a_{3D} - 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \quad \text{et} \quad \psi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \stackrel{d=2}{=} \ln(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/a_{2D}). \quad (7)$$

À 2D, le problème à deux corps admet toujours un état lié, d'énergie de liaison

$$\epsilon_{\text{dim}} = \hbar^2 q_{\text{dim}}^2 / m \quad \text{avec} \quad q_{\text{dim}} = 2 \exp(-\gamma) / a_{2D} \quad (8)$$

où $\gamma = 0,577215\dots$ est la constante d'Euler–Mascheroni. À 3D, il n'en admet un, d'énergie de liaison $\hbar^2 / m a_{3D}^2$, que pour $a_{3D} > 0$.

Le gaz est pris à l'équilibre thermique dans l'ensemble grand-canonique à une température T non nulle mais inférieure à la température de transition superfluide, $0 < T < T_c$. Comme il est non polarisé, il a même potentiel chimique dans les deux états internes, $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = \mu$. La théorie BCS statique approxime son état par un opérateur densité à N corps gaussien le plus général, $\hat{\sigma}_{\text{sta}} \propto \exp(-\beta \hat{H}_{\text{quad}})$, où $\beta = 1/k_B T$ et où $\hat{H}_{\text{quad}}$, forme quadratique en les opérateurs de champ fermioniques $\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ et leurs hermitiens conjugués, contient non seulement les termes normaux $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger} \hat{\psi}_{\sigma}$ mais aussi les termes anormaux $\hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{\psi}_{\downarrow}$ et $\hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger} \hat{\psi}_{\uparrow}$ décrivant^{4,5} la condensation par paires $\uparrow\downarrow$. Après optimisation, on trouve que $\hat{H}_{\text{quad}} = \hat{H}_{\text{sta}}$ où l'hamiltonien BCS $\hat{H}_{\text{sta}}$ se déduit de l'hamiltonien grand-canonique complet $\hat{H}_{\text{GC}}$ en remplaçant le terme quartique d'interaction par des termes quadratiques au moyen de contractions de Wick incomplètes (voir [16, section Hartree–Fock–Bogolioubov] ; le cas limite $T = 0$ est traité en détail dans [17, section 3.2]).

Cet hamiltonien quadratique est diagonalisé par la transformation de Bogolioubov, ici un développement des opérateurs de champ ou de leurs hermitiens conjugués sur les modes propres des quasi-particules BCS, des ondes planes dans le présent cas spatialement homogène :

$$\begin{pmatrix} \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow} \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}} \\ V_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \begin{pmatrix} -V_{\mathbf{k}} \\ U_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \implies \hat{H}_{\text{sta}} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (9)$$

Les opérateurs de création $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ et d'annihilation $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}$ d'une quasi-particule BCS de vecteur d'onde $\mathbf{k}$, de spin σ et d'énergie propre $\epsilon_{\mathbf{k}}$, qui sont les coefficients de ce développement, obéissent aux relations d'anticommutation fermioniques discrètes habituelles, par exemple $\{\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ avec δ le delta de Kronecker. L'expression de l'énergie E_0 du vide de quasi-particules n'est pas requise ici. On trouve pour les amplitudes modales et les énergies propres

$$U_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2}, \quad V_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = (\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}, \quad (10)$$

avec les raccourcis de notation habituels

$$\xi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} - \mu \quad \text{et} \quad E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (11)$$

³Le cas $d = 1$ est traité en champ moyen et au-delà par exemple dans la référence [14], et relève en tout cas de la théorie des systèmes intégrables par ansatz de Bethe [15].

⁴En l'absence (i) de couplage cohérent de Rabi entre $\uparrow$ et $\downarrow$ et (ii) d'appariement dans l'onde p entre mêmes états de spin, il est inutile d'inclure des termes (i) en $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger} \hat{\psi}_{-\sigma}$ et (ii) en $\hat{\psi}_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}$.

⁵À 2D, il n'y a en réalité pas de condensation des paires liées à la limite thermodynamique (sauf si $T = 0$), mais cette limitation de la théorie BCS statique importe peu ici car les fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}$ sont des observables locales — comprendre, insensibles à la portée infinie ou pas de l'ordre non diagonal. Voir aussi la référence [14], le même problème se posant à 1D (cette fois y compris à $T = 0$).

Comme annoncé, le spectre d'excitation $\epsilon_{\mathbf{k}}$ présente une bande d'énergie interdite $[0, E_{\text{gap}}]$ avec $E_{\text{gap}} = \Delta$ si $\mu \geq 0$, $E_{\text{gap}} = (\mu^2 + \Delta^2)^{1/2}$ si $\mu < 0$. Le paramètre d'ordre Δ , pris ici réel positif, satisfait selon la dimensionnalité de l'espace à

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2 a_{3D}} \stackrel{d=3}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\frac{1-2f_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \right), \quad 0 \stackrel{d=2}{=} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{1-2f_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2E_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\text{dim}}} \right), \quad (12)$$

où la loi de Fermi–Dirac $f_{\mathbf{k}} = 1/[\exp(\beta\epsilon_{\mathbf{k}}) + 1]$ donne le nombre thermique moyen $\langle \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_{\text{sta}}$ de quasi-particules fermioniques $\mathbf{k}\sigma$ et l'on a fait usage⁶ de l'identité $U_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} = \Delta/2\epsilon_{\mathbf{k}}$.

Puisque l'opérateur densité variationnel $\hat{\sigma}_{\text{sta}}$ est gaussien, le théorème de Wick s'applique et les moyennes d'observables dans la théorie BCS statique — repérées par l'indice « sta » — se déduisent des moyennes bilinéaires suivantes, dites anormales ou normales selon qu'elles brisent la symétrie $U(1)$ ou pas :

$$\langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}', t') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{sta}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} U_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} [f_{\mathbf{k}} \exp(-i\phi_{\mathbf{k}}) - (1 - f_{\mathbf{k}}) \exp(i\phi_{\mathbf{k}})] \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \quad (13)$$

$$\langle \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}', t') \rangle_{\text{sta}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} U_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} [(1 - f_{\mathbf{k}}) \exp(-i\phi_{\mathbf{k}}) - f_{\mathbf{k}} \exp(i\phi_{\mathbf{k}})] \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \quad (14)$$

$$\langle \hat{\psi}_{\uparrow}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_{\uparrow}^\dagger(\mathbf{r}', t') \rangle_{\text{sta}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} [U_{\mathbf{k}}^2 f_{\mathbf{k}} \exp(i\phi_{\mathbf{k}}) + V_{\mathbf{k}}^2 (1 - f_{\mathbf{k}}) \exp(-i\phi_{\mathbf{k}})] \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \quad (15)$$

$$\langle \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_{\uparrow}^\dagger(\mathbf{r}', t') \rangle_{\text{sta}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} [U_{\mathbf{k}}^2 (1 - f_{\mathbf{k}}) \exp(-i\phi_{\mathbf{k}}) + V_{\mathbf{k}}^2 f_{\mathbf{k}} \exp(i\phi_{\mathbf{k}})] \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \quad (16)$$

où la dépendance en temps des opérateurs de champ est celle du point de vue de Heisenberg pour l'hamiltonien $\hat{H}_{\text{sta}}$, et l'on a posé $\phi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}(t - t')/\hbar$ pour abréger. Faut-il le préciser, pour notre gaz non polarisé sans couplage de Rabi, les moyennes normales (15) et (16) ne dépendent pas de l'état interne $\sigma = \uparrow, \downarrow$ choisi et les moyennes normales croisées (entre deux états de spin différents) sont nulles.

En spécialisant la relation (15) à des positions et à des temps égaux, on obtient l'équation d'état de la théorie BCS statique, reliant la densité moyenne totale du gaz $\rho^{\text{sta}} = \rho_{\uparrow}^{\text{sta}} + \rho_{\downarrow}^{\text{sta}}$ au potentiel chimique μ et à la température T ,

$$\rho^{\text{sta}} = 2\rho_{\sigma}^{\text{sta}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left[1 - (1 - 2f_{\mathbf{k}}) \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right]. \quad (17)$$

On introduit par la même occasion le nombre d'onde de Fermi $k_{\text{F}}^{\text{sta}}$ du gaz parfait non polarisé de température nulle mais de même densité que le gaz en interaction :

$$k_{\text{F}} \stackrel{d=3}{=} (3\pi^2 \rho)^{1/3}, \quad k_{\text{F}} \stackrel{d=2}{=} (2\pi \rho)^{1/2}, \quad (18)$$

ce qui permet de définir l'énergie et la température de Fermi, $E_{\text{F}} = k_{\text{B}} T_{\text{F}} = \hbar^2 k_{\text{F}}^2 / 2m$. Enfin, en partant des définitions (1), donnons les fonctions de distribution de paires et leurs écarts à leurs valeurs asymptotiques dans la théorie BCS statique, dont nous avons souligné les insuffisances dans la section 1 :

$$\delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \rho_{\uparrow}^{\text{sta}} \rho_{\downarrow}^{\text{sta}} = + |\langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}}|^2, \quad (19)$$

$$\delta g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \rho_{\uparrow}^{\text{sta}} \rho_{\uparrow}^{\text{sta}} = - |\langle \hat{\psi}_{\uparrow}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}^\dagger(\mathbf{r}') \rangle_{\text{sta}}|^2, \quad (20)$$

⁶Nous ne spécifions pas le modèle microscopique de l'interaction, en pratique d'une portée b non nulle qu'on fait tendre vers zéro à la fin des calculs. Une possibilité est le modèle sur réseau $\mathbf{r} \in b\mathbb{Z}^d$ de la référence [18], avec interaction sur site $V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = g_0 \delta_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} / b^d$ et relation de dispersion libre $\mathbf{k} \in \mathcal{D} \mapsto E_{\mathbf{k}}$ ($\mathcal{D} = [-\pi/b, \pi/b]^d$ est la première zone de Brillouin). Dans ce cas, on a simplement $\Delta = g_0 \langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}}$ c'est-à-dire $-1/g_0 = \int_{\mathcal{D}} [d^d k / (2\pi)^d] (1 - 2f_{\mathbf{k}}) / 2\epsilon_{\mathbf{k}}$; en ajustant la constante de couplage nue g_0 pour reproduire la longueur de diffusion a_{dD} (ou plus commodément à 2D l'énergie de liaison du dimère ϵ_{dim}), puis en prenant la limite $b \rightarrow 0^+$, on arrive à l'équation (12).

avec les moyennes anormale et normale tirées des équations (13) et (15) prises à temps égaux :

$$\langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{(-\Delta)}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} (1 - 2f_{\mathbf{k}}) \exp[\mathbf{i}\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \quad (21)$$

$$\langle \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle_{\text{sta}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{2} \left[1 - (1 - 2f_{\mathbf{k}}) \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right] \exp[\mathbf{i}\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]. \quad (22)$$

Remarquons qu'à une température $T \ll E_{\text{gap}}/k_B$, on peut négliger la dissociation thermique des paires liées $\uparrow\downarrow$, donc se placer à l'ordre *zéro* en le petit paramètre $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ sans que cela soit très contraignant physiquement vu sa décroissance exponentielle, et omettre les nombres d'occupation thermiques $f_{\mathbf{k}}$. Nous verrons dans la section 3.2 que cette approximation est justifiée dans les gaz d'atomes froids aux températures minimales accessibles. Des formes analytiques peuvent alors être obtenues pour l'équation sur le paramètre d'ordre (12) et l'équation d'état (17). En dimension $d = 3$, elles font intervenir des intégrales elliptiques [19]; inspiré par la référence [20], nous les simplifions quelque peu au moyen d'un paramétrage hyperbolique $\tau = \text{argsh}(\mu/\Delta)$ et des identités $K(ix) = K(x/\sqrt{x^2+1})/\sqrt{x^2+1}$ et $E(ix) = E(x/\sqrt{1+x^2})\sqrt{1+x^2}$ ($\forall x \in \mathbb{R}$) sur les intégrales elliptiques complètes de première espèce $K(k) = F(\pi/2, k)$ et de seconde espèce $E(k) = E(\pi/2, k)$ [21] :

$$-\frac{\pi}{4a_{3D}} \left(\frac{\hbar^2}{m\Delta} \right)^{1/2} \stackrel{d=3}{=} e^{+\tau/2} [\text{ch } \tau K(\text{ie}^{\tau}) - e^{-\tau} E(\text{ie}^{\tau})], \quad (23)$$

$$\frac{3}{2} \pi^2 \rho^{\text{sta}} \left(\frac{\hbar^2}{m\Delta} \right)^{3/2} \stackrel{d=3}{=} e^{-\tau/2} [\text{ch } \tau K(\text{ie}^{\tau}) + \text{sh } \tau E(\text{ie}^{\tau})]. \quad (24)$$

En dimension $d = 2$, en revanche, elles sont explicites [22] (il suffit d'utiliser $\xi_{\mathbf{k}}$ comme variable d'intégration radiale) :

$$0 \stackrel{d=2}{=} \text{argsh} \frac{\mu}{\Delta} + \ln \frac{\epsilon_{\text{dim}}}{\Delta} \quad \text{et} \quad \rho^{\text{sta}} \stackrel{d=2}{=} \frac{m}{2\pi\hbar^2} (\mu + \sqrt{\Delta^2 + \mu^2})$$

$$\Rightarrow \Delta \stackrel{d=2}{=} [\epsilon_{\text{dim}}(2\mu + \epsilon_{\text{dim}})]^{1/2} = \frac{\hbar^2}{m} k_{\text{F}}^{\text{sta}} q_{\text{dim}} \quad \text{et} \quad \rho^{\text{sta}} \stackrel{d=2}{=} \frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\mu + \epsilon_{\text{dim}}) \quad (25)$$

Dans ce cas, la référence [1] parvient à exprimer les moyennes (21) et (22) en termes de fonctions de Bessel, ce qui est remarquable :

$$\langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}} \stackrel{d=2}{=} -\frac{m\Delta}{2\pi\hbar^2} J_0(k_{\text{F}}^{\text{sta}}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) K_0(q_{\text{dim}}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (26)$$

$$\langle \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle_{\text{sta}} \stackrel{d=2}{=} \frac{m\Delta}{2\pi\hbar^2} J_1(k_{\text{F}}^{\text{sta}}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) K_1(q_{\text{dim}}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (27)$$

Mentionnons un intérêt particulier de l'équation d'état à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ pour notre problème : dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée, la pente c (vitesse du son à température nulle) de la relation de dispersion (5) des phonons, dont la section 1 a souligné l'importance, souscrit à la relation *exacte* de l'hydrodynamique des superfluides

$$mc^2(T=0) = \rho \frac{d\mu}{d\rho} \quad (28)$$

pour l'équation d'état *approchée* $\rho^{\text{sta}}(\mu)$ de la théorie BCS statique, à cause de la nature variationnelle non perturbative de cette théorie [23]. D'où les expressions de la référence [19] à 3D (là aussi simplifiée par nos soins) et des références [19,24] à 2D :

$$mc^2 \stackrel{d=3}{=} \frac{2}{3} \Delta \frac{[E(\text{ie}^{\tau}) - K(\text{ie}^{\tau})] [\text{ch } \tau K(\text{ie}^{\tau}) + \text{sh } \tau E(\text{ie}^{\tau})]}{|E(\text{ie}^{\tau}) + (\text{ie}^{\tau} - 1) K(\text{ie}^{\tau})|^2} = \frac{2}{3} \mu \frac{1 + \frac{2\Delta^2}{3\mu\rho^{\text{sta}}g_{3D}}}{1 + \left(\frac{2\Delta}{3\rho^{\text{sta}}g_{3D}} \right)^2}, \quad (29)$$

$$mc^2 \stackrel{d=2}{=} \frac{1}{2} (\mu + \sqrt{\Delta^2 + \mu^2}) = \mu + \frac{1}{2} \epsilon_{\text{dim}} = \frac{\pi\hbar^2}{m} \rho^{\text{sta}} = E_{\text{F}}^{\text{sta}}. \quad (30)$$

L'expression au troisième membre de (29), qui fait intervenir la constante de couplage effective $g_{3D} = 4\pi\hbar^2 a_{3D}/m$, est absente de la référence [19]; nous l'avons obtenue en éliminant les intégrales elliptiques par résolution des équations (23) et (24) considérées formellement comme un système linéaire sur les inconnues $E(\text{ie}^\tau)$ et $K(\text{ie}^\tau)$. Dans la limite CBE où, à 3D, $a_{3D} > 0$ est fixé, $\mu \rightarrow -\hbar^2/2ma_{3D}^2$, $\rho^{\text{sta}} \rightarrow 0^+$ et $\Delta^2/\rho^{\text{sta}}g_{3D} \rightarrow \hbar^2/ma_{3D}^2$ [25], elle permet de vérifier facilement que $mc^2 \sim \rho^{\text{sta}}g_{3D}/4$, ce qui est de la forme attendue $m_d c^2 = \rho_d g_{3D}^{\text{dd}}$ pour un gaz bosonique de dimères $\uparrow\downarrow$ en interaction faible de masse m_d , de densité ρ_d et de constante de couplage effective g_{3D}^{dd} ; la valeur de g_{3D}^{dd} prédite est cependant assez mauvaise car la théorie BCS statique ignore la branche d'excitation acoustique du superfluide⁷. À 2D, en revanche, l'expression (30) donc l'équation d'état (25) sont catastrophiquement fausses dans cette limite, car elles ne reproduisent pas la bonne loi d'échelle $m_d c^2 \sim 2\pi\hbar^2\rho_d/[m_d|\ln(\rho_d^{1/2}a_{2D}^{\text{dd}})|]$ (voir [29] et [30, chapitre 6]), avec a_{2D}^{dd} la longueur de diffusion dimère-dimère. Cette insuffisance est due là encore à l'omission des phonons par la théorie BCS statique; si l'on en tient compte, on retrouve le logarithme de la densité⁸ attendu [31].

Signalons pour terminer que la température de transition T_c^{sta} prédite à 3D par la théorie BCS statique, solution de l'équation (12) pour $\Delta = 0$ donc pour $\epsilon_{\mathbf{k}} = |\xi_{\mathbf{k}}|$, est à peu près correcte $\propto \Delta(T=0)/k_B$ dans la limite BCS, du bon ordre de grandeur $\propto T_F/k_B$ à la limite unitaire, mais catastrophiquement fautive dans la limite CBE où elle reproduit — à un facteur près — la température de dissociation $\propto \hbar^2/[ma_{3D}^2k_B|\ln(k_F a_{3D})|]$ des dimères dans le gaz (le logarithme est une contribution entropique favorisant la brisure de paires) plutôt que la température de transition $\propto T_F$ du gaz parfait⁹ de dimères bosoniques [25]. Ce sera sans grande pertinence ici car nous nous limiterons en pratique à des températures $T \ll T_F, \Delta/k_B$ et nous nous mettrons à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ dans nos applications et résultats explicites, voir la section 3. La référence [32] montre comment aller au-delà de la théorie BCS statique dans le calcul de T_c ; en particulier, elle retrouve exactement la valeur attendue dans la limite CBE. Le point clé est encore et toujours la prise en compte de la branche d'excitation acoustique $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ ignorée par BCS statique mais qui, dans la limite CBE à nombre d'onde $q > 0$ fixé, se réduit trivialement à la mise en mouvement du centre de masse d'une paire liée avec un vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et une énergie purement cinétique $\hbar^2 q^2/4m$, donc reproduit le spectre d'excitation d'un condensat de bosons sans interaction de masse $2m$ et la fonction de partition associée.

⁷ Par définition, on a $g_{3D}^{\text{dd}} = 4\pi\hbar^2 a_{3D}^{\text{dd}}/m_d$ avec a_{3D}^{dd} la longueur de diffusion dimère-dimère tridimensionnelle. La théorie BCS statique prédit donc $a_{3D}^{\text{dd}} = 2a_{3D}$, ce qui est assez éloigné de la valeur exacte $a_{3D}^{\text{dd}} \simeq 0,60a_{3D}$ obtenue par résolution directe de l'équation de Schrödinger pour quatre fermions $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ en interaction de contact [26] ou par une méthode diagrammatique de la théorie quantique des champs [27]. L'amélioration de la théorie BCS statique au moyen de l'approximation des fluctuations gaussiennes, qui tient compte des modes de phonons, voir notre note 21, donne le résultat bien meilleur $a_{3D}^{\text{dd}} \simeq 0,55a_{3D}$ [28].

⁸ L'approximation des fluctuations gaussiennes, voir notre note 21, reproduit le comportement logarithmique avec une longueur de diffusion dimère-dimère bidimensionnelle $a_{2D}^{\text{dd}} \simeq 0,56a_{2D}$.

⁹ Introduisons l'énergie de liaison du dimère tridimensionnel $\epsilon_d \equiv \hbar^2/ma_{3D}^2$ pour abrégier. Alors, comme le dit la référence [25], l'équation (12) montre que $x_c \equiv \epsilon_d/k_B T_c^{\text{sta}} \rightarrow +\infty$ dans la limite CBE et le relie à $\delta\mu \equiv \mu + \epsilon_d/2 \rightarrow 0^+$; l'équation d'état (17) écrite pour $\Delta = 0$ relie ensuite x_c à la densité. On trouve que

$$\int_{\mathbb{R}^3} [d^3k/(2\pi)^3] [2\epsilon_d \delta\mu/(2E_{\mathbf{k}} + \epsilon_d)^2] \sim \int_{\mathbb{R}^3} [d^3k/(2\pi)^3] 2f_{\mathbf{k}}|_{\Delta=0} = \rho^{\text{sta}}|_{\Delta=0}$$

donc en définitive que $(\pi/4)\delta\mu/\epsilon_d \sim (\pi/2)^{1/2} \exp(-x_c/2)/x_c^{3/2} \sim \pi^2 \rho^{\text{sta}} a_{3D}^3$, d'où la loi d'échelle annoncée sur T_c^{sta} (plus précisément, $x_c \sim 6|\ln(k_F^{\text{sta}} a_{3D})|$, en accord avec [25]). La seule astuce simplificatrice est d'éliminer g_{3D} dans (12) au moyen de la relation $g_{3D}^{-1} = \int_{\mathbb{R}^3} [d^3k/(2\pi)^3] [(2E_{\mathbf{k}})^{-1} - (2E_{\mathbf{k}} + \epsilon_d)^{-1}]$, valable pour $g_{3D} > 0$.

2.2. L'obtention des $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en elle-même

Cette obtention résulte d'un enchaînement élémentaire de résultats connus, ne reposant au départ sur aucune approximation.

Premièrement, le facteur de structure dynamique $S_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega)$ du gaz à l'équilibre thermique, ici un tenseur à deux indices puisque nos fermions sont de spin non nul, est par définition la transformée de Fourier (au vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et à la pulsation ω) de la fonction de corrélation spatio-temporelle de la densité, si bien que

$$\begin{aligned} \langle \hat{\rho}_\sigma(\mathbf{r}, t) \hat{\rho}_{\sigma'}(\mathbf{r}', t') \rangle - \langle \hat{\rho}_\sigma(\mathbf{r}, t) \rangle \langle \hat{\rho}_{\sigma'}(\mathbf{r}', t') \rangle \\ = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} \exp\{i[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \omega(t - t')]\} S_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) \end{aligned} \quad (31)$$

où la moyenne est prise dans l'état thermique exact, l'évolution de Heisenberg correspond à l'hamiltonien exact et l'on a bien entendu $\hat{\rho}_\sigma(\mathbf{r}, t) = \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t)$ en seconde quantification. En spécialisant l'équation (31) aux temps égaux et en utilisant les relations d'anticommutation fermioniques sur les opérateurs de champ pour les mettre dans l'ordre normal comme dans la définition (1) des fonctions de distribution de paires, on obtient

$$\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\rho_\sigma \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] S_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (32)$$

où δ est la distribution de Dirac dans $\mathbb{R}^d$.

Deuxièmement, le théorème de fluctuation-dissipation (voir [33, section 124]), dit aussi théorème de Callen–Welton [34], relie le facteur de structure dynamique à la susceptibilité $\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \hbar\omega + i0^+)$, elle-même transformée de Fourier de la fonction de réponse linéaire densité-densité¹⁰, comme suit :

$$\text{Im}[\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \hbar\omega + i0^+)] = -\frac{1}{2\hbar} S_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) [1 - \exp(-\beta\hbar\omega)]. \quad (35)$$

Il en résulte que¹¹, après le changement de variable $\omega = \epsilon/\hbar$:

$$\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\rho_\sigma \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \int_{\mathbb{R}} \frac{d\epsilon}{(-\pi)} \frac{\text{Im}[\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)]}{1 - \exp(-\beta\epsilon)}. \quad (36)$$

¹⁰L'application d'un potentiel extérieur infinitésimal U dépendant du temps dans l'état interne σ' induit dans l'état interne σ , à l'instant t et au point $\mathbf{r}$, une modification de densité moyenne $\delta\rho_\sigma(\mathbf{r}, t) = \int d^d r' d^d t' \chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') U(\mathbf{r}', t')$, où la fonction de réponse est donnée par la formule de Kubo,

$$\chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_\sigma(\mathbf{r}, t), \hat{\rho}_{\sigma'}(\mathbf{r}', t')] \right\rangle \Theta(t - t'). \quad (33)$$

Dans cette formule, la moyenne et l'évolution de Heisenberg sont celles du système non perturbé et Θ est la fonction de Heaviside. Comme le gaz est initialement spatialement homogène et à l'équilibre, $\chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ est une fonction seulement des variables relatives $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et $t - t'$, dont la susceptibilité est la transformée de Fourier régularisée comme suit :

$$\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^d} d^d r \int_{\mathbb{R}} dt \chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') e^{i[z(t-t')/\hbar - \mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] } \quad (34)$$

avec $z = \hbar\omega + i\eta$, $\eta \rightarrow 0^+$. Le facteur $\exp[-\eta(t - t')/\hbar]$ ainsi introduit assure la convergence de l'intégrale sur le temps. L'expression (34) permet d'étendre $\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, z)$ au demi-plan complexe supérieur $\text{Im } z > 0$, et la propriété $[\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, z)]^* = \tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, z^*)$ au demi-plan inférieur. La fonction obtenue est analytique sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ mais admet des singularités (pôles, lignes de coupure) sur l'axe réel.

¹¹Pour un système de taille finie, il faudrait en général tenir compte, dans le facteur de structure dynamique, d'une contribution en $\delta(\omega)$ non contrainte par (35), due en particulier à un écart entre la susceptibilité thermodynamique (qui traduit le changement de densité à l'équilibre thermique en présence d'un réservoir à la température T) et la limite de pulsation nulle de la susceptibilité dynamique $\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \hbar\omega + i0^+)$ (qui traduit la réponse d'un système isolé purement hamiltonien), voir [35, chapitre 8], [14, équation (66) et annexe C].

Troisièmement, les susceptibilités densité-densité ont déjà été calculées de façon approchée au moyen de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée autour de son état stationnaire¹². En généralisant à température non nulle (comme¹³ dans la référence [36]) les résultats des références [20,37,38], nous trouvons au vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et à l'énergie complexe z que

$$\tilde{\chi}_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{q}, z) = \frac{1}{2}(\Sigma_{33} - \Sigma_{44}) + \frac{2\Sigma_{13}\Sigma_{23}\Sigma_{12} - \Sigma_{13}^2\Sigma_{22} - \Sigma_{23}^2\Sigma_{11}}{2(\Sigma_{11}\Sigma_{22} - \Sigma_{12}^2)}, \quad (37)$$

$$\tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{q}, z) = \frac{1}{2}(\Sigma_{33} + \Sigma_{44}) + \frac{2\Sigma_{13}\Sigma_{23}\Sigma_{12} - \Sigma_{13}^2\Sigma_{22} - \Sigma_{23}^2\Sigma_{11}}{2(\Sigma_{11}\Sigma_{22} - \Sigma_{12}^2)}, \quad (38)$$

où l'exposant « dtl » est mis pour « théorie BCS dépendant du temps linéarisée ». Nous avons introduit au second membre les fonctions suivantes, en sous-entendant leur dépendance en les variables $(\mathbf{q}, z) \in \mathbb{R}^d \times (\mathbb{C} \setminus \mathbb{R})$ pour alléger¹⁴ :

$$\Sigma_{11} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{(\epsilon_+ + \epsilon_-)(\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_- + \Delta^2)(1 - f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]} + \frac{(\epsilon_+ - \epsilon_-)(-\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_- + \Delta^2)(f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ - \epsilon_-)^2]} + \frac{1 - 2f_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \right\}, \quad (39)$$

$$\Sigma_{22} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{(\epsilon_+ + \epsilon_-)(\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_- - \Delta^2)(1 - f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]} + \frac{(\epsilon_+ - \epsilon_-)(-\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_- - \Delta^2)(f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ - \epsilon_-)^2]} + \frac{1 - 2f_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \right\}, \quad (40)$$

$$\Sigma_{33} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{(\epsilon_+ + \epsilon_-)(\epsilon_+ \epsilon_- - \xi_+ \xi_- + \Delta^2)(1 - f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]} + \frac{(\epsilon_+ - \epsilon_-)(-\epsilon_+ \epsilon_- - \xi_+ \xi_- + \Delta^2)(f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ - \epsilon_-)^2]} \right\}, \quad (41)$$

$$\Sigma_{44} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{(\epsilon_+ + \epsilon_-)(\epsilon_+ \epsilon_- - \xi_+ \xi_- - \Delta^2)(1 - f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]} + \frac{(\epsilon_+ - \epsilon_-)(-\epsilon_+ \epsilon_- - \xi_+ \xi_- - \Delta^2)(f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ - \epsilon_-)^2]} \right\}, \quad (42)$$

$$\Sigma_{12} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{z(\epsilon_+ \xi_- + \epsilon_- \xi_+)(1 - f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]} + \frac{z(\epsilon_+ \xi_- - \epsilon_- \xi_+)(f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ - \epsilon_-)^2]} \right\}, \quad (43)$$

$$\Sigma_{13} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{z\Delta(\epsilon_+ + \epsilon_-)(1 - f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]} + \frac{z\Delta(\epsilon_+ - \epsilon_-)(f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ - \epsilon_-)^2]} \right\}, \quad (44)$$

$$\Sigma_{23} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{\Delta(\epsilon_+ + \epsilon_-)(\xi_+ + \xi_-)(1 - f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]} + \frac{\Delta(\epsilon_+ - \epsilon_-)(\xi_+ + \xi_-)(f_+ - f_-)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ - \epsilon_-)^2]} \right\}, \quad (45)$$

¹²La littérature donne plutôt les susceptibilités sur la densité totale et sur la densité différentielle. Celles qui nous intéressent s'en déduisent par bilinéarité et invariance par échange de $\uparrow$ et $\downarrow$: $\chi_{\hat{\rho}_1 + \varepsilon \hat{\rho}_1, \hat{\rho}_1 + \varepsilon \hat{\rho}_1} = \chi_{\uparrow\uparrow} + \varepsilon \chi_{\uparrow\downarrow} + \varepsilon \chi_{\downarrow\uparrow} + \chi_{\downarrow\downarrow} = 2(\chi_{\uparrow\uparrow} + \varepsilon \chi_{\uparrow\downarrow})$ avec $\varepsilon \in \{-1; +1\}$.

¹³Les susceptibilités de la référence [36], voir ses équations (43) et (46), extensives plutôt qu'intensives, diffèrent des nôtres par un facteur $L^d/2$ pour la réponse densité totale-densité totale (notée $\tilde{\chi}_{33}$ dans [36]), et par un facteur $-L^d/2$ pour la réponse densité différentielle-densité différentielle (notée $\tilde{\chi}_{44}$ dans [36] et $2\Sigma_{44}$ ici). Signalons que les références [20,37] ont fait l'impasse sur la densité différentielle.

¹⁴Dans le modèle sur réseau $\mathbf{r} \in b\mathbb{Z}^d$ de la note 6, le contre-terme des équations (39) et (40) vaut simplement $-1/g_0$; on l'a remplacé par son expression donnée dans la note avant de prendre la limite $b \rightarrow 0^+$. On vérifie que $\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z) \rightarrow 0$ lorsque $(\mathbf{q}, z) \rightarrow (0, 0)$, une propriété clé pour l'existence d'une branche d'excitation acoustique à tous les ordres en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ (il faut dans ce cas généraliser l'équation (59) sur $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ par prolongement analytique au demi-plan complexe inférieur; on garde la propriété de départ linéaire (5) mais avec une vitesse du son $c(T)$ complexe, voir les références [39,40]; cette vitesse complexe ignore cependant l'amortissement de Landau sur branche acoustique convexe car la théorie BCS dépendant du temps linéarisée ignore l'interaction entre phonons, voir [41, note 64]).

avec les notations très compactes¹⁵

$$\mathbf{k}_\pm = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2, \quad \xi_\pm = \xi_{\mathbf{k}_\pm}, \quad \epsilon_\pm = \epsilon_{\mathbf{k}_\pm}, \quad f_\pm = f_{\mathbf{k}_\pm}. \quad (46)$$

On notera que les fonctions Σ_{ij} sont de parité bien définie pour la variable z (elles sont paires, sauf Σ_{12} et Σ_{13} qui sont impaires), et qu'elles ne sont pas indépendantes, au sens où

$$\begin{aligned} \Sigma_{11}(\mathbf{q}, z) - \Sigma_{22}(\mathbf{q}, z) &= \Sigma_{33}(\mathbf{q}, z) - \Sigma_{44}(\mathbf{q}, z) \\ \text{et} \quad \Sigma_{13}(\mathbf{q}, z) &= \frac{z}{2\Delta} [\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z) - \Sigma_{22}(\mathbf{q}, z)] \quad \forall (\mathbf{q}, z). \end{aligned} \quad (47)$$

On a bien entendu $\tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^{\text{dnl}} \equiv \tilde{\chi}_{\uparrow\downarrow}^{\text{dnl}}$ et $\tilde{\chi}_{\downarrow\downarrow}^{\text{dnl}} \equiv \tilde{\chi}_{\downarrow\uparrow}^{\text{dnl}}$ par symétrie entre les deux états de spin. Toutes ces susceptibilités sont des fonctions paires de z .

Le report des expressions (37) et (38) dans l'équation (36) conduit aux fonctions $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée. Nous les étudions en détail dans la suite.

2.3. Isoler la partie collective dans les $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$

Il se trouve que les premières contributions au second membre de (37) et (38), avant les grandes fractions, ne sont autres que les susceptibilités densité-densité de la théorie BCS statique. Pour le voir, il suffit d'appliquer la formule de Kubo (33) à cette théorie puis de faire directement usage du théorème de Wick et des fonctions de corrélation à deux temps (13), (14), (15) et (16), sans chercher à calculer le commutateur. Des manipulations élémentaires¹⁶ conduisent aux fonctions de réponse pour $t > t'$ (elles sont nulles pour $t < t'$) :

$$\begin{aligned} \chi_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} U_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_1} U_{\mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_2} \left\{ [e^{i(\phi_{\mathbf{k}_1} + \phi_{\mathbf{k}_2})} - e^{-i(\phi_{\mathbf{k}_1} + \phi_{\mathbf{k}_2})}] (f_{\mathbf{k}_1} + f_{\mathbf{k}_2} - 1) \right. \\ &\quad \left. + [e^{i(\phi_{\mathbf{k}_1} - \phi_{\mathbf{k}_2})} - e^{-i(\phi_{\mathbf{k}_1} - \phi_{\mathbf{k}_2})}] (f_{\mathbf{k}_2} - f_{\mathbf{k}_1}) \right\} \exp[i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \end{aligned} \quad (48)$$

¹⁵En partant des définitions (10), nous avons éliminé les amplitudes modales $U_\pm = U_{\mathbf{k}_\pm}$ et $V_\pm = V_{\mathbf{k}_\pm}$ au moyen des relations

$$\begin{aligned} (U_+ V_- + s U_- V_+)^2 &= (\epsilon_+ \epsilon_- - \xi_+ \xi_- + s \Delta^2) / 2 \epsilon_+ \epsilon_-, \\ (U_+ U_- + s V_+ V_-)^2 &= (\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_- + s \Delta^2) / 2 \epsilon_+ \epsilon_-, \\ (U_+ V_- + s U_- V_+)(U_+ U_- + s V_+ V_-) &= \Delta(\epsilon_+ + s \epsilon_-) / 2 \epsilon_+ \epsilon_-, \\ (U_+ V_- + s U_- V_+)(U_+ U_- - s V_+ V_-) &= \Delta(\xi_+ + s \xi_-) / 2 \epsilon_+ \epsilon_-. \end{aligned}$$

($s \in \{-1; +1\}$). On remarque que, dans les fonctions Σ_{ij} , le second terme se déduit du premier si l'on fait le changement formel $\epsilon_- \rightarrow -\epsilon_-$ (qui a pour effet de changer f_- en $1 - f_-$) sans toucher ni à ϵ_+ ni aux $\xi_\pm$.

¹⁶L'invariance par parité permet de changer à volonté le signe des vecteurs d'onde sous les exponentielles de Fourier, donc en particulier — comme dans (49) — de symétriser l'intégrande dans les intégrales sur deux vecteurs d'onde au moyen des identités

$$\begin{aligned} \int d^d k_1 \int d^d k_2 f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \exp[i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] &= \int d^d k_1 \int d^d k_2 f(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1) \exp[i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \\ &= \int d^d k_1 \int d^d k_2 (1/2) [f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + f(-\mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1)] \exp[i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \end{aligned}$$

Dans notre cas, les amplitudes modales et les énergies propres, donc les fonctions f , non contentes d'être paires, dépendent seulement des modules des vecteurs d'onde.

et

$$\begin{aligned} \chi_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} \left\{ \left[e^{i(\phi_{\mathbf{k}_1} + \phi_{\mathbf{k}_2})} - e^{-i(\phi_{\mathbf{k}_1} + \phi_{\mathbf{k}_2})} \right] \frac{1}{2} (U_{\mathbf{k}_1}^2 V_{\mathbf{k}_2}^2 + U_{\mathbf{k}_2}^2 V_{\mathbf{k}_1}^2) (f_{\mathbf{k}_1} + f_{\mathbf{k}_2} - 1) \right. \\ &\quad \left. + \left[e^{i(\phi_{\mathbf{k}_1} - \phi_{\mathbf{k}_2})} - e^{-i(\phi_{\mathbf{k}_1} - \phi_{\mathbf{k}_2})} \right] (f_{\mathbf{k}_1} - f_{\mathbf{k}_2}) \frac{1}{2} (U_{\mathbf{k}_1}^2 U_{\mathbf{k}_2}^2 + V_{\mathbf{k}_1}^2 V_{\mathbf{k}_2}^2) \right\} \exp[i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]. \end{aligned} \quad (49)$$

Il reste à prendre la transformée de Fourier spatio-temporelle comme dans l'équation (34) après le changement de variables de jacobien unité $\mathbf{k}_{1,2} = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2$ pour trouver le résultat annoncé :

$$\tilde{\chi}_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}, z) = \frac{1}{2} [\Sigma_{33}(\mathbf{q}, z) - \Sigma_{44}(\mathbf{q}, z)], \quad \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}, z) = \frac{1}{2} [\Sigma_{33}(\mathbf{q}, z) + \Sigma_{44}(\mathbf{q}, z)]. \quad (50)$$

Ainsi, la grande fraction dans (37) et (38) — c'est exactement la même dans les deux cas — tient compte des excitations collectives (les phonons de Bogoliubov–Anderson) ignorées par la théorie BCS statique et par les références [1,2]. En vue des études qui vont suivre, isolons sa contribution aux fonctions de distribution de paires en posant (un exposant « dtl » serait redondant sur la contribution collective) :

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) &= \frac{2\Sigma_{13}\Sigma_{23}\Sigma_{12} - \Sigma_{13}^2\Sigma_{22} - \Sigma_{23}^2\Sigma_{11}}{2(\Sigma_{11}\Sigma_{22} - \Sigma_{12}^2)} \\ \text{et} \quad \delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) &\equiv \int_{\mathbb{R}} \frac{d\epsilon}{(-\pi)} \frac{\text{Im}[\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)]}{1 - \exp(-\beta\epsilon)}. \end{aligned} \quad (51)$$

Il en résulte que

$$\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (52)$$

avec la contribution collective commune

$$\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]. \quad (53)$$

Nous en déduisons en particulier les belles relations naturellement équivalentes

$$\delta g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (54)$$

$$\delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \delta g_{\downarrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \delta g_{\downarrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (55)$$

sur la seconde desquelles nous reviendrons dans l'équation (70). Pour être complet, calculons la transformée de Fourier des $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ au sens de l'équation (53) en appliquant le théorème de fluctuation-dissipation — plus précisément l'équation (36) qui en résulte — aux susceptibilités (50) de la théorie BCS statique¹⁷ :

$$\delta\tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}) = + \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{4\epsilon_+ \epsilon_-} (1 - 2f_+) (1 - 2f_-), \quad (56)$$

$$\delta\tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}) = - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{4} \left[1 - \frac{\xi_+}{\epsilon_+} (1 - 2f_+) \right] \left[1 - \frac{\xi_-}{\epsilon_-} (1 - 2f_-) \right]. \quad (57)$$

¹⁷ En gros, il suffit d'utiliser la propriété $\text{Im}\{\epsilon_0/[(\epsilon + i0^+)^2 - \epsilon_0^2]\} = (\pi/2)[\delta(\epsilon + \epsilon_0) - \delta(\epsilon - \epsilon_0)]$ et de ne pas passer à côté de simplifications remarquables comme

$$(1 - f_+ - f_-)\{\exp[\beta(\epsilon_+ + \epsilon_-)] + 1\}/\{\exp[\beta(\epsilon_+ + \epsilon_-)] - 1\} - (f_+ - f_-)\{\exp[\beta(\epsilon_+ - \epsilon_-)] + 1\}/\{\exp[\beta(\epsilon_+ - \epsilon_-)] - 1\} = 1.$$

Pour faire disparaître le Dirac dans (36), on se souvient de l'expression (17) de $\rho_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}$ et on réalise que

$$\int d^d q \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \int d^d k f(\mathbf{k}_{\pm}) = (2\pi)^d \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int d^d k f(\mathbf{k})$$

pour toute fonction f d'intégrale convergente sur $\mathbb{R}^d$.

Les formes factorisées de l'intégrande — en une fonction de ϵ_+ fois la même fonction de ϵ_- — annoncent les expressions de Wick (19) et (20) des $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, qui sont des carrés parfaits, et que l'on retrouve par le changement de variables de jacobien unité $(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \mapsto (\mathbf{k}_+, \mathbf{k}_-)$ dans la prise de la transformée de Fourier inverse des $\delta \tilde{g}_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$.

2.4. Différentes formulations en termes d'intégrales curvilignes et applications

L'écriture de la contribution collective $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ dans (51), reflétant directement celle originelle du théorème de fluctuation-dissipation (35), est malcommode à utiliser, analytiquement et numériquement, car son intégrande est très singulier.

En effet, comme on le voit sur leurs définitions (39)–(45), les fonctions $z \mapsto \Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ admettent des lignes de coupure sur l'axe réel, là où les dénominateurs s'annulent pour certaines valeurs du vecteur d'intégration $\mathbf{k}$, en pratique de son module k et de son angle θ avec le vecteur d'onde $\mathbf{q}$ (tel que $\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} = kq \cos \theta$). Le dénominateur des secondes contributions entre accolades s'annule si $z = \pm(\epsilon_+ - \epsilon_-)$; c'est la condition de résonance du processus de transfert d'une quasi-particule fermionique préexistante — thermique — du vecteur d'onde $\mathbf{k}_- = \mathbf{k} - \mathbf{q}/2$ au vecteur d'onde $\mathbf{k}_+ = \mathbf{k} + \mathbf{q}/2$ ou le contraire par un potentiel extérieur d'excitation de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et de pulsation $z/\hbar = \omega$ (une excitation de Bragg dans les expériences d'atomes froids [42]). Or, lorsque $\mathbf{k}$ décrit $\mathbb{R}^d$, la différence d'énergie $\epsilon_+ - \epsilon_-$ décrit¹⁸ $\mathbb{R}$; les fonctions Σ_{ij} admettent donc l'axe réel tout entier comme ligne de coupure.

Heureusement, la situation se simplifie un peu à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ où nous nous placerons — sauf exception — dans la section 3 : les nombres d'occupation fermioniques $f_{\pm}$ sont alors mis à zéro, et les fonctions Σ_{ij} se réduisent aux premières contributions entre accolades. Dans ce cas, les fonctions Σ_{ij} présentent une ligne de coupure seulement sur les demi-droites réelles $]-\infty, -E_{\text{bord}}(\mathbf{q})]$ et $[E_{\text{bord}}(\mathbf{q}), +\infty[$, où $E_{\text{bord}}(\mathbf{q}) = \inf_{\mathbf{k}}(\epsilon_+ + \epsilon_-)$ est le bord inférieur du continuum de paire brisée à vecteur d'onde total $\mathbf{q}$ fixé (sous l'effet d'un potentiel d'excitation transmettant une impulsion $\hbar \mathbf{q}$ bien définie, une paire liée $\uparrow\downarrow$ du condensat peut se briser en deux quasi-particules fermioniques de quantité de mouvement totale fixée $\hbar \mathbf{q}$ mais de vecteur d'onde relatif $\mathbf{k}$ libre dans $\mathbb{R}^d$; aussi la variation d'énergie correspondante décrit-elle un intervalle de $\mathbb{R}$). On a explicitement¹⁹ (voir [23,44]) :

$$E_{\text{bord}}(\mathbf{q}) = \begin{cases} 2\Delta & \text{si } \mu \geq 0 \text{ et } q < 2(2m\mu/\hbar^2)^{1/2}, \\ 2\epsilon_{\mathbf{q}/2} & \text{sinon,} \end{cases} \quad (58)$$

où, dans le cas $\mu > 0$, $k_{\min} = (2m\mu/\hbar^2)^{1/2}$ est la position du minimum $E_{\text{gap}} = \Delta$ de la relation de dispersion $k \mapsto \epsilon_{\mathbf{k}}$ des quasi-particules fermioniques (pour $\mu < 0$, le minimum $E_{\text{gap}} = (\mu^2 + \Delta^2)^{1/2}$ est atteint en $k = 0$). De plus, si le nombre d'onde q appartient au domaine d'existence $q \in \mathcal{E}_{\text{son}}$ de la branche d'excitation acoustique dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée²⁰, la

¹⁸Pour le voir, il suffit, à $\mathbf{q}$ non nul fixé, de prendre les limites $k \rightarrow +\infty$ et $\cos \theta \rightarrow 0$ en maintenant constant le produit $k \cos \theta$; alors $\epsilon_+ - \epsilon_- \sim \xi_+ - \xi_- = \hbar q k (\cos \theta)/m$ tend vers toute valeur souhaitée.

¹⁹Il serait trop naïf de croire que les lignes de coupure admettent comme seuls points de branchement leurs extrémités $\pm E_{\text{bord}}(\mathbf{q})$. Suivant les valeurs de q et de la force des interactions, il peut y avoir un ou deux autres points de branchement dans $]E_{\text{bord}}(\mathbf{q}), +\infty[$ et dans $]-\infty, -E_{\text{bord}}(\mathbf{q})]$, que l'on identifie comme points anguleux dans des densités spectrales $\rho_{ij}(\mathbf{q}, \epsilon)$ (telles que $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z) \propto \int d\epsilon \rho_{ij}(\mathbf{q}, \epsilon)/(z - \epsilon)$ ou, si l'on préfère, $\text{Im} \Sigma_{ij}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+) \propto \rho_{ij}(\mathbf{q}, \epsilon)$) [20]. Le même phénomène se produit au-delà de l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, avec la possibilité de points de branchement supplémentaires, purement thermiques [43]. Les références [20,43] sont à 3D mais leurs considérations s'appliquent à 2D, sauf bien sûr l'expression finale des densités spectrales en termes d'intégrales elliptiques dans [20], qui résulte de la forme $\int d(\cos \theta)$ de l'intégrale polaire en dimension trois.

²⁰À 2D, un mode de phonon existe à tout nombre d'onde $q > 0$, $\mathcal{E}_{\text{son}}^{d=2} =]0, +\infty[$ [24]. À 3D, le domaine d'existence est borné connexe, $\mathcal{E}_{\text{son}}^{d=3} =]0, q_{\text{sup}}[$, pour $a_{3D} < 0$ c'est-à-dire pour $\Delta/\mu \in]0; 1,162[$; il est à deux composantes connexes, $\mathcal{E}_{\text{son}}^{d=3} =]0, q_{\text{sup}}[\cup]q_{\text{inf}}, +\infty[$ si $\Delta/\mu \in]1,162; 1,729[$; il vaut enfin le demi-axe réel tout entier, $\mathcal{E}_{\text{son}}^{d=3} =]0, +\infty[$, si $\Delta/\mu > 1,729$ ou $\mu < 0$ [23,45].

susceptibilité collective (51) admet un pôle en l'énergie propre $\hbar\omega_{\mathbf{q}} \in]0, E_{\text{bord}}(\mathbf{q})[$ du phonon de Bogolioubov–Anderson correspondant, et en son opposé $-\hbar\omega_{\mathbf{q}}$, puisque l'on a par définition^{21,22}

$$[\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z)\Sigma_{22}(\mathbf{q}, z) - \Sigma_{12}^2(\mathbf{q}, z)]|_{z=\pm\hbar\omega_{\mathbf{q}}} = 0. \quad (59)$$

Tirons les fruits de cette discussion, et remplaçons dans l'expression (51) de $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ l'axe réel par d'utiles chemins d'intégration restant à distance non nulle des singularités dans le plan complexe.

Le premier choix, applicable à tous les ordres en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ et utilisé dans nos calculs numériques de la section 3.2, tire parti de l'analyticité de $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ et de la propriété $[\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)]^* = \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z^*)$ (valables en réalité au-delà de l'approximation BCS dépendant du temps linéarisée) pour écrire

$$\text{Im}[\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)] = [\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+) - \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, \epsilon - i0^+)]/(2i) \quad (60)$$

et pour séparer les deux domaines d'intégration apparus $\mathbb{R} + i0^+$ et $\mathbb{R} - i0^+$ en deux chemins $-\infty + i\eta \rightarrow +\infty + i\eta$ et $+\infty - i\eta \rightarrow -\infty - i\eta$, parcourus en sens inverse et à distance non infinitésimale $\eta > 0$ de l'axe réel, appelés respectivement C_h (chemin haut) et C_b (chemin bas) sur la figure 2(a). On aboutit alors à

$$\begin{aligned} \boxed{\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})} &= -k_B T \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, 0) + \int_{C_h \cup C_b} \frac{dz}{(-2i\pi)} \frac{\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)}{1 - \exp(-\beta z)} \\ &= \boxed{-k_B T \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, 0) + \text{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{(-\pi)} \frac{\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, \epsilon + i\eta)}{1 - \exp[-\beta(\epsilon + i\eta)]} }. \end{aligned} \quad (61)$$

Deux remarques s'imposent :

- (i) la séparation en deux chemins a fait apparaître un pôle non physique en $z = 0$, dont le contre-terme $\propto T$ au second membre de (61) compense la contribution déduite du théorème des résidus²³; ce pôle ne posait aucun problème dans la formulation originelle (51) car $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z = 0)$ est de valeur réelle, donc de partie imaginaire nulle;
- (ii) le dénominateur $1 - \exp(-\beta z)$ fait apparaître les pôles thermiques $z = 2i\pi n k_B T$, $n \in \mathbb{Z}^*$; ceux d'indices $n = \pm 1$ limitent l'excursion verticale de C_h et C_b ; dans le numérique, pour éviter de trop s'en approcher, nous prenons $\eta = \pi k_B T$ selon la doctrine du « juste milieu »,

²¹On obtient la même équation aux valeurs propres dans l'approximation des fluctuations gaussiennes, c'est-à-dire dans une formulation par intégrale de chemin où, après introduction d'un champ auxiliaire dans la transformation de Hubbard–Stratonovich puis sommation sur les degrés de liberté fermioniques, on quadratise l'action obtenue autour de son point stationnaire BCS statique [19,25,28,32,46] (on tombe ainsi sur une intégrale de chemin gaussienne qu'on sait calculer, mais c'est une autre histoire). Pour convaincre le lecteur, comparons explicitement à [28] : dans les notations de cette référence, l'équation aux valeurs propres s'écrit $M_{11}(\mathbf{q}, z)M_{22}(\mathbf{q}, z) = M_{12}(\mathbf{q}, z)M_{21}(\mathbf{q}, z)$; or, nous trouvons que $M_{11} = (\Sigma_{11} + \Sigma_{22})/2 + \Sigma_{12}$, $M_{22} = (\Sigma_{11} + \Sigma_{22})/2 - \Sigma_{12}$ et $M_{12} = M_{21} = (\Sigma_{22} - \Sigma_{11})/2$ en omettant à nouveau les variables $(\mathbf{q}, z)$. Il suffit de développer et simplifier pour retrouver (59).

²²Si l'on quitte l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, $z \mapsto \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ n'admet plus de pôle; en revanche, son prolongement analytique à travers sa ligne de coupure du demi-plan supérieur au demi-plan inférieur en admet, et les énergies propres du son correspondantes sont complexes — les phonons deviennent des résonances [43].

²³On retrouve ce résultat avec une astuce moins-plus et la théorie des distributions : pour que l'intégrande dans (51) devienne une fonction seulement de $\epsilon + i0^+$ (et pas de ϵ), on écrit

$$\begin{aligned} \text{Im}[\tilde{\chi}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)]/[1 - \exp(-\beta\epsilon)] &= \text{Im}\{\tilde{\chi}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)/[1 - \exp(-\beta\epsilon)]\} \\ &= \text{Im}\{\tilde{\chi}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)/[1 - \exp(-\beta(\epsilon + i0^+))]\} + \text{Im}[\tilde{\chi}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)\phi(\epsilon)] \end{aligned}$$

en omettant l'indice « coll » pour alléger. La distribution introduite, $\phi(\epsilon) = 1/[1 - \exp(-\beta\epsilon)] - 1/[1 - \exp(-\beta(\epsilon + i0^+))]$, n'a une action non nulle que sur un voisinage de l'origine; on peut donc linéariser l'exponentielle et écrire $\phi(\epsilon) = k_B [1/\epsilon - 1/(\epsilon + i0^+)] = k_B T [1/\epsilon - \text{v.p.}(1/\epsilon) + i\pi\delta(\epsilon)]$ avec v.p. la distribution valeur principale et δ la distribution de Dirac. Comme $\text{Im}[\tilde{\chi}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)]$ tend vers zéro en $\epsilon = 0$, la distribution $1/\epsilon - \text{v.p.}(1/\epsilon)$ est sans effet, seule la contribution du Dirac est non nulle, et l'on reproduit le contre-terme de (61).

et calculons en pratique seulement la contribution de C_h , celle de C_b s'en déduisant par changement de signe et conjugaison complexe, comme au troisième membre²⁴ de (61).

À l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, un deuxième choix de chemin d'intégration s'impose. Puisqu'il n'y a plus de ligne de coupure entre $-E_{\text{bord}}(\mathbf{q})$ et $E_{\text{bord}}(\mathbf{q})$, on peut enlever dans $C_h \cup C_b$ une portion centrale entourant le pôle non physique $z = 0$ comme seule singularité, au prix de l'ajout de segments verticaux AD et BC reliant C_h à C_b , voir la figure 2(a); on écrit donc $C_h \cup C_b = C_g \cup ABCD \cup C_d$ où le rectangle $ABCD$ est parcouru dans le sens des aiguilles d'une montre, le contour C_g est à gauche et le contour C_d est à droite, voir la figure 2(b). Les segments verticaux ajoutés ont une contribution nulle dans l'ensemble, car ils sont parcourus en des sens opposés; l'intégrale curviligne sur $ABCD$ compense le contre-terme $\propto T$ d'après le théorème des résidus; il reste

$$\boxed{\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})} = \int_{C_g \cup C_d} \frac{dz}{(-2i\pi)} \frac{\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)}{1 - \exp(-\beta z)} = \int_{C_d} \frac{dz}{(-i\pi)} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta z) - 1} \right). \quad (63)$$

On a simplifié encore l'expression au troisième membre, en utilisant le fait que C_g se déduit de C_d par changement de z en $-z$, orientation comprise; il en résulte que $\int_{C_g} dz f(z) = \int_{C_d} dz [-f(-z)]$ pour toute fonction f de la variable complexe, et donc que seule la partie impaire de l'intégrande subsiste, ce qui fait apparaître une distribution de Bose-Einstein²⁵. Cependant, l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ n'est pas implémenté de façon entièrement cohérente, puisqu'on a omis les nombres d'occupation fermioniques $f_{\pm}$ dans $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ tout en gardant la loi de Bose thermique pour des énergies complexes z de partie réelle arbitrairement grande dans C_d .

Nous effectuons donc un dernier changement de chemin d'intégration, en tirant parti de l'absence de singularité entre le pôle de phonon $z = \hbar\omega_{\mathbf{q}}$ et le point de branchement $z = E_{\text{bord}}(\mathbf{q})$ du continuum, pour remplacer C_d par $c_d \cup L_d$ où le contour circulaire c_d entoure le pôle de phonon et le lacet L_d entoure la ligne de coupure — le continuum de paire brisée à $\mathbf{q}$ fixé — dans le sens des aiguilles d'une montre comme sur la figure 2(c). Comme les points du lacet sont de partie réelle $\text{Re } z \gtrsim E_{\text{bord}}(\mathbf{q}) \geq E_{\text{gap}}$, il faut y négliger la loi de Bose thermique à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ où nous sommes. La même approximation ne peut être faite de manière générale sur c_d car l'énergie propre du phonon $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ devient arbitrairement inférieure à $k_B T > 0$ à faible nombre d'onde q . Nous séparons en définitive la transformée de Fourier de $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en une contribution du phonon ϕ de Bogolioubov-Anderson (s'il existe au vecteur d'onde $\mathbf{q}$ considéré,

²⁴Dans ce troisième membre, refermons le chemin d'intégration $-\infty + i\eta \rightarrow +\infty + i\eta$ par un demi-cercle à l'infini dans le demi-plan complexe supérieur (en admettant que l'intégrale soit nulle sur le demi-cercle) puis appliquons le théorème des résidus : comme la susceptibilité est analytique pour $\text{Im } z > 0$, les seules singularités entourées sont les pôles thermiques et il vient

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) = -k_B T \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, 0) - 2k_B T \text{Re} \sum_{n=1}^{+\infty} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, 2i\pi n k_B T) = -k_B T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, 2i\pi n k_B T) \quad (62)$$

après usage de la propriété $[\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)]^* = \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z^*)$ dans la seconde égalité. Nous aboutissons ainsi à une série de Matsubara bosonique [47] (les $2i\pi n k_B T$ sont précisément les énergies complexes de Matsubara pour des bosons) sans jamais avoir introduit de fonction de Green à N corps ni de conditions aux limites périodiques en temps imaginaire! Pour notre calcul numérique de la section 3.2, qui met une coupure $k < k_{\text{max}}$ sur le vecteur d'onde interne des paires dans les fonctions Σ_{ij} , la représentation (62) aurait, par rapport à l'intégration sur ϵ dans (61), l'avantage d'un pas $\delta\epsilon$ plus grand mais l'inconvénient d'une convergence asymptotique beaucoup plus lente : l'erreur commise en tronquant la série de Matsubara à $n = n_{\text{max}}$ tend vers zéro comme $1/n_{\text{max}}$, au lieu de s'annuler exactement au-delà d'un certain ϵ_{max} dans (61), voir la note 39; il y aurait bien une parade (on pourrait estimer analytiquement le bout négligé $n > n_{\text{max}}$ à l'aide d'un développement asymptotique du sommande) mais elle serait laborieuse; aussi n'avons-nous pas utilisé (62). Pour terminer, remarquons que, dans la limite d'une température nulle $T \rightarrow 0^+$, la série de Matsubara — vue comme une somme de Riemann — est remplacée par une intégrale, celle de l'expression (66) avec $\eta = +\infty$.

²⁵La susceptibilité $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ est une fonction paire de z — voir les remarques après (46) et (47) — et l'on a $1/[1 - \exp(-\beta z)] - 1/[1 - \exp(\beta z)] = 1 + 2/[\exp(\beta z) - 1]$.

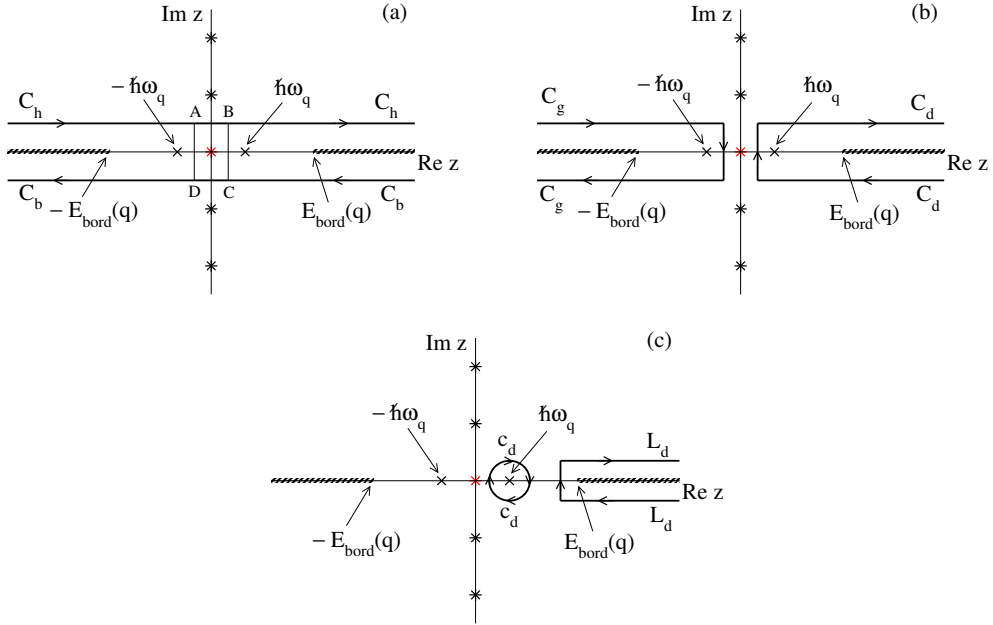


FIGURE 2. Différents chemins d'intégration utilisés à température $T > 0$ dans la réécriture de la quantité $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ de l'équation (51) sous forme d'intégrales curvilignes dans le plan complexe, ayant l'avantage — aussi bien numérique qu'analytique — de rester à distance non infinitésimale des singularités de l'intégrande. (a) Dans le cas général, à tous les ordres en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, voir l'équation (61). (b) À l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ dans la susceptibilité $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ mais pas dans le dénominateur thermique de l'intégrande de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$, voir l'équation (63). (c) À l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ partout, voir l'équation (64). Lignes hachurées : lignes de coupure de la susceptibilité (pour la lisibilité de la figure, on s'est limité dans (a) aussi à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$; en réalité, la ligne de coupure devrait y recouvrir tout l'axe réel). Symboles $\times$: pôles $\pm \hbar \omega_{\mathbf{q}}$ de la susceptibilité à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ ($\omega_{\mathbf{q}} > 0$ est la pulsation propre du phonon de Bogolioubov–Anderson, solution de l'équation (59), si elle existe au nombre d'onde q considéré). Étoiles : pôles de Bose $z = 2i\pi n k_B T$, n entier relatif (racines du dénominateur thermique) dans (61); le pôle non physique $n = 0$ est en rouge. Le bord $E_{\text{bord}}(\mathbf{q})$ du continuum de paire brisée à vecteur d'onde total $\mathbf{q}$ fixé est donné par l'équation (58). Dans les noms des chemins, les indices h et b signifient haut et bas, les indices g et d signifient gauche et droite, C signifie chemin, c signifie contour, L signifie lacet. Les flèches marquent l'orientation des chemins. Le rectangle ABCD intervient dans le raisonnement faisant passer de la forme (61) à la forme (63). En (a), les chemins C_h et C_b doivent passer entre l'axe réel et les pôles de Bose $n = \pm 1$ qui en sont les plus proches. Cette contrainte est bien sûr inopérante en (b) et en (c).

voir la note 20 sur le domaine d'existence $\mathcal{E}_{\text{son}}$ de la branche acoustique, sinon $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}^{\phi}(\mathbf{q}) = 0$) et une contribution collective du continuum de paire brisée,

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) = \delta \tilde{g}_{\text{coll}}^{\phi}(\mathbf{q}) + \delta \tilde{g}_{\text{coll}}^{C^0}(\mathbf{q})$$

où

$$\begin{cases} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}^{\phi}(\mathbf{q}) = \int_{c_d} \frac{dz}{(-i\pi)} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta z) - 1} \right) = \left(\bar{n}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) \Phi(\mathbf{q}), \\ \delta \tilde{g}_{\text{coll}}^{C^0}(\mathbf{q}) = \int_{L_d} \frac{dz}{(-2i\pi)} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z). \end{cases} \quad (64)$$

Ici, en vertu du théorème des résidus appliqué à l'intégrale sur le contour c_d , $\bar{n}_{\mathbf{q}}$ est le nombre d'occupation thermique du mode de phonon $\mathbf{q}$ et $\Phi(\mathbf{q})$ est deux fois le résidu de la susceptibilité collective en $z = \hbar \omega_{\mathbf{q}}$:

$$\bar{n}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\exp(\beta \hbar \omega_{\mathbf{q}}) - 1} \quad \text{et} \quad \Phi(\mathbf{q}) = \frac{-s_{11}(|\Sigma_{11}|^{1/2} \Sigma_{23} - s_{11} s_{12} |\Sigma_{22}|^{1/2} \Sigma_{13})^2}{\frac{d}{dz} (\Sigma_{11} \Sigma_{22} - \Sigma_{12}^2)} \Big|_{(\mathbf{q}, z = \hbar \omega_{\mathbf{q}})} \quad (65)$$

avec s_{ij} le signe de $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, \hbar\omega_{\mathbf{q}})$. L'expression de $\Phi(\mathbf{q})$ se vérifie en développant le carré au numérateur et en reconnaissant la définition (51) au moyen de l'équation (59), selon laquelle $s_{11} = s_{22}$ et $\Sigma_{12} = s_{12}|\Sigma_{11}\Sigma_{22}|^{1/2}$ au point considéré.

Dans les formulations (63) et (64), les distances à l'axe réel sur les chemins C_d , c_d et L_d ne sont plus contraintes par la température (elles n'ont pas à être inférieures à $2\pi k_B T$), mais le rayon de c_d doit rester inférieur à $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ et à $E_{\text{bord}}(\mathbf{q}) - \hbar\omega_{\mathbf{q}}$. Si l'on veut que le chemin d'intégration reste à distance non infinitésimale des singularités de l'intégrande :

- (i) le chemin $c_d \cup L_d$ ne convient pas près d'un point q_* où la branche acoustique rejoint le continuum de paire brisée ($E_{\text{bord}}(\mathbf{q}) - \hbar\omega_{\mathbf{q}} \rightarrow 0$ si $q \rightarrow q_*$) et il vaut mieux revenir au chemin C_d et à l'expression (63);
- (ii) même C_d ne convient plus dans la limite $q \rightarrow 0$ où $\hbar\omega_{\mathbf{q}} \rightarrow 0$ et il faut revenir à C_h et à l'expression (61).

Pour conclure, expliquons la particularité du cas $T = 0$ qui nous a conduit à l'éviter dans nos calculs numériques : la définition (51) de $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ se réduit certes à

$$\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \stackrel{T=0}{=} \int_0^{+\infty} \frac{d\epsilon}{(-\pi)} \text{Im}[\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)] = \text{Im} \left[\left(\int_0^{i\eta} + \int_{i\eta}^{i\eta+\infty} \right) \frac{dz}{(-\pi)} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) \right], \quad (66)$$

il n'y a plus trace de pôle non physique en $z = 0$ et l'écart vertical $\eta > 0$ à la ligne de coupure peut être choisi librement au troisième membre, mais le chemin d'intégration, partant forcément de l'origine, ne peut rester à distance non infinitésimale du pôle de phonon $z = \hbar\omega_{\mathbf{q}}$ si $q \rightarrow 0$.

2.5. Quelle équation d'état dans notre théorie BCS dépendant du temps linéarisée?

Par essence, le théorème de fluctuation-dissipation donne accès aux écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ des fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à leurs valeurs asymptotiques $\rho_{\sigma}\rho_{\sigma'}$. Or, dans les gaz d'atomes froids, ce sont précisément ces fonctions $g_{\sigma\sigma'}$ qui intéressent les numériciens et les expérimentateurs, voir notre section 3.2. Il nous faut donc connaître la densité du gaz, ici non polarisé ($\rho_{\uparrow} = \rho_{\downarrow} = \rho/2$), pour compléter les $\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en les $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

Grâce à la théorie BCS dépendant du temps linéarisée, nous avons amélioré le calcul des $\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ au moyen des fonctions de réponse densité-densité $\chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ mais nous n'avons pas touché au reste de la théorie BCS statique, en particulier pas aux observables à un corps. Il semblerait donc entendu que l'équation d'état grand-canonique $\rho(\mu, T)$ reste la même, et que l'on ait

$$g_{\sigma\sigma'}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \stackrel{?}{=} \rho_{\sigma}^{\text{sta}} \rho_{\sigma'}^{\text{sta}} + \delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (67)$$

où $\rho_{\sigma}^{\text{sta}}$ est donnée par (17). En réalité, il en va autrement, car la fonction $\delta g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ contient de façon un peu cachée une information sur la densité moyenne. En effet, les particules dans l'état interne $\uparrow$ sont des fermions identiques sans interaction directe entre eux (pas de résonance dans l'onde p), si bien que leur densité de paires doit être de limite nulle à distance nulle :

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow 0^+} g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0 \quad \text{donc} \quad \lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow 0^+} \delta g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\rho_{\uparrow}^2. \quad (68)$$

En revenant aux séparations (52) et (53) de $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en parties statique et collective, nous en déduisons la bonne valeur de la densité du gaz non polarisé dans notre théorie BCS dépendant du temps linéarisée et les bonnes expressions des distributions de paires²⁶ :

$$\frac{1}{4} [\rho^{\text{dtl}}(\mu, T)]^2 = \frac{1}{4} [\rho^{\text{sta}}(\mu, T)]^2 - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \quad (69)$$

et

$$g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho_{\sigma}^{\text{dtl}} \rho_{\sigma'}^{\text{dtl}} + \delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') .$$

Dans les exemples numériques de la section 3.2, à très basse température $k_B T \ll mc^2, E_{\text{gap}}$ donc pratiquement dans l'état fondamental, nous trouvons que la fonction $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$, définie dans l'équation (51), est partout négative, voir l'équation (93); on a alors $\rho^{\text{dtl}} > \rho^{\text{sta}}$ à potentiel chimique μ fixé ou, si l'on préfère, $\mu^{\text{dtl}} < \mu^{\text{sta}}$ à densité ρ fixée (la stabilité thermodynamique du gaz en phase spatialement homogène exige que $\partial_{\mu} \rho > 0$, voir l'équation (28)). Voilà qui va dans le bon sens, celui d'une amélioration de la théorie BCS variationnelle.

Grâce à l'équation d'état (69), nous pouvons maintenant préciser la valeur commune des deux différences dans la belle relation (55) et écrire joliment :

$$g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) [e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} - 1] . \quad (70)$$

Rappelons-le, les deux théories (statique ou pas) doivent être prises dans (70) au même potentiel chimique, pas à la même densité; c'est évident dans la présente section 2 puisque nous sommes dans un point de vue grand-canonique, mais ça ne le sera pas toujours dans la suite, voir la section 3.2. Nous sommes parvenu au résultat (70) — qui servira en particulier dans la section 3.3 — au moyen de la chaîne d'égalités évidentes au vu des équations (1), (52), (53) et (69) :

$$\begin{aligned} g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \rho_{\sigma}^{\text{dtl}} \rho_{\sigma'}^{\text{dtl}} - \rho_{\sigma}^{\text{sta}} \rho_{\sigma'}^{\text{sta}} + [\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \\ &= \frac{1}{4} [\rho^{\text{dtl}}(\mu, T)]^2 - \frac{1}{4} [\rho^{\text{sta}}(\mu, T)]^2 + \delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &= - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) + \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} . \end{aligned} \quad (71)$$

3. Résultats explicites sur les $g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, numériques et analytiques

Dans cette section, nous présentons l'ensemble de nos résultats sur les fonctions de distribution de paires dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée. D'abord à grande distance dans la section 3.1, où nous obtenons analytiquement à basse température une belle loi raccordant le régime asymptotique quantique $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty$ mais $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll \lambda_{\phi}$ au régime asymptotique thermique $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \lambda_{\phi} \rightarrow +\infty$ où $\lambda_{\phi} = \hbar c / k_B T$ est la longueur d'onde thermique des phonons du superfluide. Ensuite numériquement aux distances intermédiaires dans la section 3.2, d'une fraction de k_F^{-1} à quelques k_F^{-1} (k_F est le nombre d'onde de Fermi) dans le régime d'interaction forte, domaine de prédilection des simulations de Monte-Carlo quantique et des mesures expérimentales dans les gaz d'atomes froids. Enfin à courte distance donc aux grands nombres d'onde q dans la section 3.3, où des lois simples décrivent la divergence de $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ et le départ de $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de la valeur nulle. Tous ces résultats sont obtenus à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, c'est-à-dire à suffisamment basse température pour qu'on puisse mettre ommettre les nombres d'occupation $f_{\mathbf{k}}$ des

²⁶Nous avons utilisé dans (52) — écrite pour $\sigma = \sigma' = \uparrow$ — la propriété (68) pour BCS statique et BCS dépendant du temps linéarisé; l'intégrale sur $\mathbf{q}$ dans (69) n'est autre que la limite de $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ lorsque $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0^+$, limite dont l'existence et l'expression annoncée sont établies dans la section 3.3 pour la théorie à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$.

quasi-particules fermioniques dans la théorie BCS statique et dans les fonctions Σ_{ij} donnant les susceptibilités densité-densité $\tilde{\chi}_{\sigma\sigma'}^{\text{dfl}}(\mathbf{q}, z)$.

3.1. Comportement des $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à grande distance et basse température

Au vu de la séparation des écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en parties statique et collective dans (52), et du comportement asymptotique connu — à décroissance rapide — des parties statiques, voir les références [1,2] complétées par notre note 2, il reste à travailler sur la partie collective $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ commune aux fonctions de distribution de paires. Une technique élémentaire dans la section 3.1.1 donne un équivalent asymptotique de $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à température nulle, en loi de puissance et de signe négatif, mais ne fournit aucune autre indication que la décroissance rapide à température $T > 0$. Une technique plus sophistiquée dans la section 3.1.2 comble cette lacune et trouve que les $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sont négatifs et à peu près égaux à $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à suffisamment grande distance $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty$ et basse température $T \rightarrow 0^+$. Ces résultats infirment la théorie BCS statique, en particulier sa prédiction phare (2) partout positive, mais sont confirmés dans la section 3.1.3 par une théorie effective de basse énergie que l'on pense être exacte.

3.1.1. Ce qu'on déduit de l'intégration par parties

Une première technique pour déterminer le comportement à grande distance d'une intégrale de Fourier isotrope comme celle (53) donnant $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ consiste, après moyenne angulaire $\langle \exp[\mathbf{i}\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \rangle_{\text{ang}} = \sin(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)/(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ en dimension $d = 3$ ou $\langle \exp[\mathbf{i}\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \rangle_{\text{ang}} = J_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ en dimension $d = 2$, à intégrer par parties de façon répétée [48]. Nous reprenons ici [5, équations (8.300) et (8.307)] :

$$\int_0^{+\infty} dq \phi(q) \sin(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Big|_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty} = \sum_{s=0}^S (-1)^s \frac{\phi^{(2s)}(0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2s+1}} + O\left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2S+3}}\right), \quad (72)$$

$$\int_0^{+\infty} dq J_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \phi(q) \Big|_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty} = \sum_{s=0}^S (-1)^s \frac{\phi^{(2s)}(0) \Gamma(s+1/2)}{\Gamma(1/2) s! |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2s+1}} + O\left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2S+3}}\right), \quad (73)$$

où S est un entier naturel quelconque, $\phi(q) = q \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) / 2\pi^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ en dimension $d = 3$ et $\phi(q) = q \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) / 2\pi$ en dimension $d = 2$.

Or, pour $\text{Im } z \neq 0$, les fonctions $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ de la section 2.2 sont formellement des fonctions paires du nombre d'onde q , au sens où elles sont des intégrales sur un vecteur d'onde interne $\mathbf{k}$ de fonctions lisses de $\mathbf{k}$ invariantes par changement de $\mathbf{q}$ en $-\mathbf{q}$; cette propriété s'étend à la susceptibilité $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ donnant $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ dans (51) et, après intégration dans le plan complexe sur un chemin restant *toujours* à distance non infinitésimale des singularités de l'intégrande, à la fonction $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ elle-même. À température non nulle, cette contrainte est satisfaite par la représentation (61), si bien que $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ n'admet que des puissances paires dans son développement limité en $q = 0$:

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \stackrel{T>0}{=} \sum_{q=0}^S c_{2s} q^{2s} + O(q^{2S+2}) \quad (74)$$

avec des coefficients qui importent peu pour l'instant. À l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, le même raisonnement sur le lacet L_d dans (64) montre que la contribution du continuum — indépendante de la température — jouit de la même propriété,

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}^{C_0}(\mathbf{q}) \stackrel{C_0}{=} \sum_{q=0}^S c_{2s}^{C_0} q^{2s} + O(q^{2S+2}) \quad (75)$$

avec les deux premiers coefficients calculés analytiquement dans l'annexe A, voir l'équation (137). Bien que l'équation aux valeurs propres (59) soit formellement une fonction paire de q

et de $\omega_{\mathbf{q}}$, la pulsation propre $\omega_{\mathbf{q}}$ du phonon $\mathbf{q}$ dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée est de départ linéaire comme dans (5) donc n'admet que des puissances impaires²⁷,

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}} \underset{q \rightarrow 0}{=} \hbar c q \left[1 + \sum_{s=1}^S \zeta_s \left(\frac{\hbar q}{mc} \right)^{2s} + O(q^{2S+2}) \right], \quad (76)$$

dont^{28,29} les premiers coefficients ζ_s sont connus [24,45]. Écrivons tout de même le coefficient ζ_2 à 3D, car l'astuce d'écriture (29) nous permet de le simplifier grandement³⁰ :

$$\zeta_2^{\text{dtl}} \underset{d=3}{=} \frac{32 + 64z^2 + 52z^4 + 4xz(24 + 53z^2 + 39z^4) + x^2(-35 - 56z^2 + 13z^4 + 54z^6)}{-8 \times 135x^2(1 + z^2)^3} \bigg|_{\substack{x = \frac{\Delta}{\mu}, \\ z = \frac{2\Delta}{3\rho^{\text{sta}}_{g3D}}}}. \quad (77)$$

De façon similaire, comme son expression (65) est formellement paire en q mais impaire en $\omega_{\mathbf{q}}$ (à cause de la dérivée d/dz au dénominateur), la fonction $\Phi(\mathbf{q})$ dans la contribution à $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ du phonon de Bogolioubov–Anderson n'admet que des puissances impaires³¹ :

$$\Phi(\mathbf{q}) \underset{q \rightarrow 0}{=} \sum_{s=0}^S \frac{\Phi^{(2s+1)}(0)}{(2s+1)!} q^{2s+1} + O(q^{2S+3}). \quad (78)$$

La dérivée première en zéro est calculée dans l'annexe A, voir l'équation (147), et s'écrit en dimension quelconque :

$$\Phi'(0) = \frac{\hbar\rho^{\text{sta}}}{4mc}. \quad (79)$$

À température non nulle, les fonctions $\phi(q)$ dans (72) et (73) n'admettent donc dans leur développement que des puissances impaires de q . On en déduit que toutes leurs dérivées d'ordre pair $\phi^{(2s)}(q)$ sont nulles en $q = 0$, et que l'écart $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est à décroissance rapide (plus rapide que toute loi de puissance $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2S+1}$). Comme c'était déjà le cas pour les écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de la théorie BCS statique, voir³² les références [1,2] et notre note 2, cette conclusion s'étend aux écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en vertu des relations (52) et nous écrivons symboliquement :

$$\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\overset{T>0}{\approx}} O(1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^\infty) \quad (80)$$

sans que rien ne puisse être dit sur le signe à ce stade.

En revanche, à température nulle, la loi de Bose $\bar{n}_{\mathbf{q}}$ disparaît dans (64) et $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ acquiert des puissances impaires de q , celles de la fonction $\Phi(\mathbf{q})$; il n'y a pas de contradiction avec le raisonnement conduisant à (74) car la condition de distance non infinitésimale aux singularités

²⁷La pulsation au carré n'a certes que des puissances paires, $\omega_{\mathbf{q}}^2 = \omega_0^2 + c^2 q^2 + O(q^4)$, mais la prise de la racine carrée change la donne puisque $\omega_0 = 0$.

²⁸À 3D, les fluctuations quantiques du champ bosonique des phonons, ignorées dans la théorie de champ classique qu'est BCS dépendant du temps linéarisée, font apparaître dans $\omega_{\mathbf{q}}$ un terme en $q^5 \ln q$, et même un terme imaginaire pur en q^5 — effet de l'amortissement de Belyaev — si la branche acoustique est de départ convexe ($\zeta_2 > 0$) [49,50].

²⁹On sait aussi en dimension quelconque que, dans la limite CBE où le spectre d'excitation acoustique se réduit à celui de Bogolioubov pour un condensat ou un quasi-condensat de dimères bosoniques, $\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{\text{Bog}} = [(\hbar^2 q^2 / 2m_d)(2m_d c^2 + \hbar^2 q^2 / 2m_d)]^{1/2}$ avec $m_d = 2m$ la masse d'un dimère, on doit avoir $\zeta_s \rightarrow (-1)^s \Gamma(s - 1/2) / [\Gamma(-1/2) s! 4^{2s}]$ en vertu de [5, équation (8.303)] et de la relation $\Gamma(1/2) = (-1/2)\Gamma(-1/2)$.

³⁰Il y a un piège à éviter : en comparant [45, équation (12)], $mc^2 = (2\mu/3)(1 + xy)/(1 + y^2)$ où $y = \partial_{\mu}\Delta|_{g3D}$, à notre équation (29), on pourrait croire que $y = z$. En réalité — on le voit bien à la limite unitaire — il faut prendre pour y la racine non évidente de l'équation $(1 + xy)/(1 + y^2) = (1 + xz)/(1 + z^2)$, à savoir $y = (x - z)/(1 + xz)$; son report dans [45, équation (16)] donne notre expression (77).

³¹Voilà qui est cohérent avec (74) car, par la vertu du terme $1/2$, $\bar{n}_{\mathbf{q}} + 1/2 = 1/2 \text{th}(\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}/2)$ en facteur de $\Phi(\mathbf{q})$ dans $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}^{\phi}(\mathbf{q})$ n'admet à température $T > 0$ que des puissances impaires dans son développement.

³²Les références [1,2] sont à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ mais la propriété reste vraie au-delà; il suffit d'appliquer (72) et (73) aux fonctions $\delta\tilde{g}_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ des équations (56) et (57). D'ailleurs, notre note 2, qui va à tous les ordres en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ dans sa seconde partie, le confirme explicitement.

ne peut être satisfaite dans l'état fondamental du système lorsque $q \rightarrow 0$, voir l'équation (66). L'ordre dominant suffit ici ($S = 1$ dans (72) et (73)) :

$$\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\overset{T=0}{\simeq}} \delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\overset{T=0}{\simeq}} \begin{cases} -\frac{\Phi'(0)}{2\pi^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^4} & \text{en } d=3, \\ -\frac{\Phi'(0)}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} & \text{en } d=2. \end{cases} \quad (81)$$

Puisque $\Phi'(0) > 0$, la fonction de distribution de paires de fermions de spins opposés tend vers sa valeur asymptotique par en dessous, en contradiction avec la théorie BCS statique (2) mais en accord avec la discussion physique de la section 1.

3.1.2. Ce qu'on déduit d'une formulation par intégrale de contour

Passons maintenant à une seconde technique d'étude à grande distance des intégrales de Fourier isotropes, utile lorsque le résultat est à décroissance rapide, donc à température non nulle, voir par exemple [48] et [5, section 8.7.3.2].

Commençons par le cas $d = 3$, plus facile. La fonction $\phi(q)$ dans (72) ne présente dans son développement que des puissances impaires de q ; on admet qu'elle peut être prolongée formellement en une fonction lisse et impaire de q sur $\mathbb{R}$ tout entier. La fonction sinus étant impaire, l'intégrande est pair et l'on peut écrire

$$\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \stackrel{d=3}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2i} \phi(q) \exp(iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|). \quad (82)$$

En admettant ensuite que $\phi(q)$ admet un prolongement analytique à $q \in \mathbb{C}$ en $O(1/q^\alpha)$ à l'infini³³, avec $\alpha > 1$, on transforme (82) en intégrale de contour en refermant le chemin d'intégration par un grand demi-cercle dans le demi-plan supérieur, avec contournement des éventuelles lignes de coupure. Le théorème de Cauchy permet enfin de décaler vers le haut la partie horizontale du chemin d'intégration, jusqu'à atteindre la première singularité k_0 de l'intégrande, que ce soit un pôle ou un point de branchement. On s'attend alors à ce que $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ décroisse à l'infini comme $\exp(-\kappa_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ avec $\kappa_0 = \text{Im } k_0 > 0$, à un facteur en loi de puissance près³⁴.

Malheureusement, au contraire de la note 2 où nous avons pu appliquer jusqu'au bout cette technique à la théorie BCS statique, la fonction $\phi(q)$ mise en jeu ici n'a pas d'expression simple et ses singularités dans le plan complexe ne sont pas connues analytiquement. Pour avancer, nous nous plaçons donc dans la limite où la température tend vers zéro, en pratique dans le régime

$$k_B T \ll mc^2, \Delta, E_F. \quad (83)$$

Les singularités les plus proches de l'axe réel, qui conduisent donc aux exponentielles de $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ décroissant le plus lentement, sont alors les pôles $q_n \simeq 2i\pi n k_B T / \hbar c$ ($n \in \mathbb{N}^*$) du nombre d'occupation thermique $\bar{n}_{\mathbf{q}} \simeq [\exp(\beta \hbar c q) - 1]^{-1}$ du mode de phonon $\mathbf{q}$ dans l'expression (64), et le théorème des résidus donne finalement³⁵ à 3D :

$$\boxed{\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\overset{T \rightarrow 0^+}{\simeq}} \delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\overset{T \rightarrow 0^+}{\simeq}} -\frac{2\pi}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3 \Phi'(0) \sum_{n=1}^{+\infty} n^2 \exp\left(-\frac{2\pi n k_B T}{\hbar c} |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\right).} \quad (84)$$

Comme à température nulle, le résultat est à valeurs négatives. Physiquement, pour entrer dans le régime des grandes distances, il faut que $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \gg 1/k_F$, mais aussi que $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \gg \hbar/mc$ dans la

³³ L'annexe B montre que $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) = O(1/q^4)$ donc que $\phi(q) = O(1/q^3)$ sur l'axe réel.

³⁴ En particulier, on a sur le contour d'intégration la majoration $|\exp(iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)| \leq \exp(-\kappa_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$.

³⁵ La sommation peut être effectuée explicitement, $\sum_{n \geq 1} n^2 z^n = g_{-2}(z) = z(z+1)/(1-z)^3$ où g_α est une fonction de Bose ou polylogarithme.

limite CBE (c'est la longueur de relaxation ξ du condensat de dimères) et que $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \hbar k_F / m\Delta$ dans la limite BCS (c'est la taille d'une paire liée ℓ_{paire}). En revanche, on n'a pas à mettre de contrainte sur le rapport entre $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ et la longueur d'onde thermique des phonons $\lambda_\phi = \hbar c / k_B T$. En particulier, les deux situations extrêmes sont bien décrites et continûment raccordées par (84), ce qui en fait toute l'originalité :

- (i) le cas où $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ diverge plus vite que λ_ϕ et où la somme est dominée par le terme $n = 1$, qui donne à un facteur en loi de puissance près la décroissance exponentielle attendue avec $\kappa_0 = 2\pi k_B T / \hbar c$ (régime asymptotique thermique) ;
- (ii) le cas où $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ diverge plus lentement que λ_ϕ et où la somme sur n peut être remplacée par une intégrale (régime asymptotique quantique). Dans ce second cas, les fonctions de distribution de paires ne voient pas que le système est à température non nulle, et l'on retrouve exactement³⁶ l'équivalent algébrique (81) en $d = 3$.

Terminons par le cas $d = 2$, plus technique. La difficulté est que $J_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ est une fonction paire de q , ce qui rend l'intégrande de (73) impair et empêche d'étendre l'intégration à $\mathbb{R}$ tout entier. Nous nous sortons de ce mauvais pas en reprenant l'idée de [5, section 8.7.3.2] et en l'étendant à tous les ordres en $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Pour cela, nous remplaçons la fonction de Bessel par son développement asymptotique

$$J_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \underset{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\simeq} \left(\frac{2}{\pi q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right)^{1/2} \left[\cos\left(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - \frac{\pi}{4}\right) u(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - \sin\left(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - \frac{\pi}{4}\right) \frac{v(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right]$$

où les fonctions $u(x)$ et $v(x)$ sont données dans [21, alinéa §8.451(1)] sous forme de séries ne présentant que des puissances paires de $1/x$. On montre alors comme dans la référence [5] que, pour toute fonction $f_-(q)$ impaire sur $\mathbb{R}$ et pour toute fonction $f_+(q)$ paire sur $\mathbb{R}$, on a³⁷ grâce à la racine carrée $q^{1/2}$:

$$\int_0^{+\infty} \frac{dq}{q^{1/2}} f_-(q) \cos(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - \pi/4) = e^{-i\pi/4} \int_{-\infty+i0^+}^{+\infty+i0^+} \frac{dz}{2z^{1/2}} f_-(z) e^{iz|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (85)$$

$$\int_0^{+\infty} \frac{dq}{q^{1/2}} f_+(q) \sin(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - \pi/4) = -e^{i\pi/4} \int_{-\infty+i0^+}^{+\infty+i0^+} \frac{dz}{2z^{1/2}} f_+(z) e^{iz|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (86)$$

ce qu'il reste à appliquer à $f_-(q) = \phi(q)u(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ et à $f_+(q) = \phi(q)v(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)/q$. La suite ressemble au 3D. Il faut seulement penser à remarquer que $u(ix) + v(ix)/x = (2x/\pi)^{1/2} \exp(x) K_0(x)$, en vertu de [21, relation §8.451(6)]. On trouve en définitive à 2D que

$$\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtt}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\overset{T \rightarrow 0^+}{\simeq}} \delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\overset{T \rightarrow 0^+}{\simeq}} -4\pi \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3 \Phi'(0) \sum_{n=1}^{+\infty} n^2 K_0 \left(\frac{2\pi n k_B T}{\hbar c} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \right). \quad (87)$$

Comme à 3D, cet approximant, à notre connaissance original, est à valeurs négatives (on a $\Phi'(0) > 0$ et $K_0(x) > 0 \forall x > 0$) et raccorde continûment le régime asymptotique thermique au régime asymptotique quantique. En particulier :

- (i) en limitant la somme au terme $n = 1$ et en remplaçant la fonction K_0 par un équivalent asymptotique $K_0(x) \sim (\pi/2x)^{1/2} \exp(-x)$, on retrouve la décroissance exponentielle attendue (à un facteur en loi de puissance près)

$$\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtt}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{\text{puis } T \rightarrow 0^+}{\underset{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty}{\simeq}} -\frac{2\pi}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{1/2}} \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^{5/2} \Phi'(0) \exp(-\kappa_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad \text{avec} \quad \kappa_0 = 2\pi k_B T / \hbar c; \quad (88)$$

³⁶On donne $\int_0^{+\infty} dx x^2 \exp(-x) = 2$.

³⁷La première relation est [5, équation (8.349)] ; la seconde s'en déduit par dérivation par rapport à $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. L'idée intuitive est que la racine carrée d'un nombre réel négatif contient un facteur $\exp(i\pi/2)$, c'est-à-dire précisément la phase relative entre les composantes de Fourier de $\cos(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - \pi/4)$ ou de $\sin(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - \pi/4)$ (au signe près pour le sinus).

- (ii) en remplaçant dans (87) la somme sur n par une intégrale, on retrouve exactement³⁸ l'équivalent algébrique à température nulle (81) en $d = 2$.

3.1.3. Ce qu'en dit l'hydrodynamique quantique

Prenons maintenant un peu de recul, et demandons-nous dans quelle mesure les beaux approximations (84) et (87) sont spécifiques de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée. Il apparaît que, dans la double limite des basses températures $T \rightarrow 0^+$ et des grandes distances $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty$ considérée, on peut faire usage d'une théorie effective de basse énergie, l'hydrodynamique quantique de Landau et Khalatnikov [51]. On s'attend à ce que cette théorie soit exacte à l'ordre dominant en température pour tout système — même fortement corrélé comme l'hélium liquide — (i) siège d'interactions à courte portée et (ii) entièrement superfluide dans son état fondamental. Notre gaz de fermions de spin 1/2 non polarisé et en interaction de contact satisfait à ces deux conditions, voir plus de détails dans [12, annexe B] et une explication pédagogique dans la référence [41]. Alors :

- (i) le fluide admet dans son état fondamental une branche d'excitation acoustique de départ linéaire $\omega_{\mathbf{q}} \sim c q$, avec une vitesse du son c reliée à son équation d'état *exacte* par la relation hydrodynamique (28) ;
- (ii) à suffisamment basse température, on peut assimiler l'état d'équilibre des phonons, qui sont les quanta de ces excitations acoustiques, à celui d'un gaz parfait de bosons de potentiel chimique nul $\mu_{\phi} = 0$ donc d'opérateur densité à N corps $\hat{\sigma}_{\phi} \propto \exp(-\beta \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}})$;
- (iii) dans une description à gros grains, les fluctuations de densité du fluide à valeur opérateur sont dominées — toujours à suffisamment basse température — par les phonons et admettent le développement modal

$$\delta \hat{\rho}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \rho_{\mathbf{q}} (\hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad \rho_{\mathbf{q}} = \left(\frac{\hbar \rho q}{2mc} \right)^{1/2}. \quad (89)$$

Ici, ρ est la densité moyenne *exacte* du fluide dans son état fondamental, m est la masse d'une particule du fluide et les opérateurs de création $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ et d'annihilation $\hat{b}_{\mathbf{q}}$ d'un phonon de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ obéissent aux habituelles relations de commutation bosoniques, par exemple $[\hat{b}_{\mathbf{q}}, \hat{b}_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$. D'où la fonction de corrélation de la densité totale à la limite thermodynamique dans cette théorie,

$$\langle \delta \hat{\rho}(\mathbf{r}) \delta \hat{\rho}(\mathbf{r}') \rangle_{\text{hydro}} = \int_{q < \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} 2\rho_{\mathbf{q}}^2 \left(\bar{n}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \quad (90)$$

où la coupure ultraviolette Λ est $\gg k_B T / \hbar c$ mais $\ll mc / \hbar$. Or, les deux états internes $\sigma' = \uparrow, \downarrow$ jouant des rôles symétriques pour un spin σ très distant, et la dissociation thermique des paires $\uparrow\downarrow$ étant exponentiellement négligeable dans notre gaz de fermions à basse température, on doit avoir à grande distance (à distance en tout cas beaucoup plus grande que la taille d'une paire liée, $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \ell_{\text{paire}}$) :

$$\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \simeq \frac{1}{4} \langle \delta \hat{\rho}(\mathbf{r}) \delta \hat{\rho}(\mathbf{r}') \rangle_{\text{hydro}}. \quad (91)$$

La comparaison à (64) impose

$$\Phi(\mathbf{q}) \underset{q \rightarrow 0^+}{\sim} \frac{\hbar \rho q}{4mc}. \quad (92)$$

L'expression (79) de $\Phi'(0)$ et les approximations asymptotiques (81), (84) et (87) qui en dérivent sont donc exacts et très généraux — ces derniers résultent de propriétés mathématiques trivialement satisfaites par l'intégrande de (90) — pourvu que l'on y remplace la densité et la vitesse du son BCS par leurs vraies valeurs dans le gaz.

³⁸On donne $\int_0^{+\infty} dx x^2 K_0(x) = \pi/2$.

En conclusion, dans notre gaz de fermions non polarisé à suffisamment basse température, les fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sont en certains points, en particulier à suffisamment grande distance $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, strictement en dessous de leurs valeurs asymptotiques. Cette propriété, en contradiction directe avec la théorie BCS statique pour $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, voir l'équation (2), résulte des fluctuations quantiques ou thermiques des positions des centres de masse des paires liées induites par les phonons, grands absents de cette théorie. Elle vaut aussi bien pour la théorie BCS dépendant du temps linéarisée que pour la réalité physique.

3.2. Résultats numériques

Nous calculons numériquement les fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de la section 2 au moyen de leur décomposition (52), puis de la représentation (61) de la partie collective $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — en réalité de sa transformée de Fourier $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ — par intégrale curviligne dans le plan complexe. Pour simplifier³⁹, nous nous plaçons à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ c'est-à-dire que nous omettons partout les facteurs thermiques fermioniques $f_{\mathbf{k}}, f_{\pm}$, en particulier dans les fonctions $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ donc dans la susceptibilité $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$.

Pour tester le calcul numérique de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$, nous comparons aux comportements aux limites (160) et (105) obtenus analytiquement; dans les exemples considérés ici, qui sont tous à très basse température, la limite à faible q est négative comme celle à grand q , et nous trouvons que $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ raccorde de façon monotone l'une à l'autre, en restant donc partout négative :

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \stackrel{\text{num}}{<} 0 \quad \forall \mathbf{q}. \quad (93)$$

Les motivations de notre étude numérique sont doubles :

- (i) il s'agit de voir si $\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/\rho_{\uparrow}\rho_{\downarrow}$ peut prendre des valeurs négatives significatives (par rapport à l'unité) dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée, question à laquelle l'étude asymptotique de la section 3.1 ne peut répondre;

³⁹Dans le numérique, nous avons introduit une coupure isotrope suffisamment grande $k < k_{\text{max}}$ sur le vecteur d'onde interne $\mathbf{k}$ dans les fonctions $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$, avec $k_{\text{max}} = 273(m\Delta/\hbar^2)^{1/2}$ dans la colonne de gauche (cas 3D) et $k_{\text{max}} = 157q_{\text{dim}}$ dans la colonne de droite (cas 2D) de la figure 3. L'intérêt est aussi que la ligne de coupure sur z commençant à $E_{\text{bord}}(\mathbf{q})$ ne va pas au-delà de $\epsilon_{\text{max}} \simeq \hbar^2(k_{\text{max}}^2 + q^4/4) - 2\mu$, puisque les dénominateurs d'énergie dans les $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ ne peuvent plus s'annuler si $z = \epsilon > 0$ est trop grand; le chemin d'intégration C_h peut alors rejoindre l'axe réel par un segment vertical entre $z = \epsilon_{\text{max}} + i\eta$ (avec $\eta = \pi k_B T$ comme il est dit après l'équation (61)) et le point terminal $z = \epsilon_{\text{max}}$. De plus, il est inutile d'explorer C_h en deçà de $\text{Re } z = -2E_{\text{gap}}$ à cause de la suppression exponentielle par le dénominateur thermique dans (61). Dans l'intégration sur ϵ , nous avons pris un pas $\delta\epsilon = 0,2 \min(\Delta, \hbar c q, k_B T, \eta)$ (voir à ce propos la note 24). Dans l'intégration sur le module de $\mathbf{k}$, nous avons pris un pas $\delta k = 0,2 \min(\max((m\mu)^{1/2}/\hbar, (m\Delta)^{1/2}/\hbar), m\Delta/\hbar^2/(m\mu/\hbar^2)^{1/2})$ pour $\mu > 0$ et — cas non exploré — $\delta k = 0,2 \max((-m\mu)^{1/2}/\hbar, (m\Delta)^{1/2}/\hbar)$ pour $\mu \leq 0$. Dans l'intégrale sur l'angle θ entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{q}$, réduit à l'intervalle $[0, \pi/2]$ par symétrie, nous avons pris 30 points. Nous avons vérifié que les résultats changent peu si l'on divise par deux l'un des pas d'intégration $\delta\epsilon, \delta k$ ou $\delta\theta$. Dans le calcul numérique de la transformée de Fourier inverse donnant $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à partir de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$, nous mettons une coupure $q_{\text{max}} = k_{\text{max}}/2$ sur le nombre d'onde q , et nous prenons un pas $\delta q = 0,1(m\Delta/\hbar^2)^{1/2}$ à 3D et $\delta q = 0,13q_{\text{dim}}$ à 2D. La coupure q_{max} choisie serait très insuffisante pour $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ si l'on calculait directement la transformée de Fourier inverse de $\delta \tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{q})$ sans utiliser la décomposition (52); en effet, la contribution $\delta \tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ de la théorie BCS statique décroît lentement avec q , voir l'équation (118), alors que la contribution collective $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ décroît comme $1/q^4$, voir l'équation (105). La partie $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ s'obtient beaucoup plus facilement au travers des moyennes anormale et normale comme dans (19) et (20); à 2D, ces moyennes sont connues analytiquement, voir les équations (26) et (27); à 3D, elles sont données par les intégrales sur $\mathbf{k}$ (21) et (22) dont l'évaluation numérique poserait aussi un problème de troncature numérique sur k [2] si l'intégrande n'était pas connu analytiquement : on peut évaluer le bout omis numériquement au moyen d'un développement asymptotique de l'intégrande, ou carrément utiliser une représentation astucieuse par intégrale de contour, voir notre note 2 et la référence [2]. Enfin, à 3D, la précision numérique sur $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ à grand q ne suffit pas à bien décrire le départ de $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à courte distance $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$; nous préférons calculer le bout $q > 15(m\Delta/\hbar^2)^{1/2}$ de la transformée de Fourier inverse après la substitution $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \simeq C/q^4 + D/q^5 + E/q^6$; les coefficients C et D sont donnés dans l'équation (106), le coefficient E s'obtient par ajustement.

- (ii) il s'agit de comparer cette théorie à d'autres approches ou à des mesures dans un gaz d'atomes froids fermioniques.

3.2.1. Cas tridimensionnel; comparaison au Monte-Carlo quantique de Giorgini

En dimension $d = 3$, nous nous plaçons à la limite unitaire $a_{3D}^{-1} = 0$; c'est le régime d'interaction maximale accessible en phase gazeuse, donc a priori le plus difficile à décrire, mais c'est aussi le plus étudié, théoriquement et expérimentalement dans les gaz d'atomes froids, et le plus intéressant car il est invariant d'échelle. Prenons dans le numérique une température suffisamment basse pour pouvoir nous placer à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$,

$$\frac{k_B T}{\Delta} = 0,144 \quad (94)$$

où Δ est le paramètre d'ordre BCS. Le potentiel chimique étant positif, on a alors $E_{\text{gap}} = \Delta$ et $\exp(-\beta E_{\text{gap}}) \simeq 10^{-3} \ll 1$. Des équations (23) et (24) de la théorie BCS statique et de la définition (18) du nombre d'onde de Fermi, nous tirons $\mu/\Delta = 0,860436\dots$ et $\mu/E_F^{\text{sta}} = 0,590605\dots$. Le rapport μ/E_{gap} prédit est proche de la valeur mesurée aux températures les plus basses accessibles mais le rapport μ/E_F en est assez loin, puisqu'on trouve dans les expériences $E_{\text{gap}}/E_F \simeq 0,44$ [52] et $\mu/E_F \simeq 0,376(4)$ [53], ce qui conduit à $\mu/\Delta \simeq 0,86$ (en admettant qu'on ait aussi $E_{\text{gap}} = \Delta$ dans la réalité physique). Heureusement, l'équation d'état modifiée (69) de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée fait nettement mieux : elle ne change certes pas le rapport μ/Δ mais donne

$$\frac{\mu}{E_F^{\text{dnl}}} \simeq 0,401 \quad (95)$$

ce qui, par ailleurs, est en parfait accord avec l'approximation des fluctuations gaussiennes, voir les références [28,46] et notre note 21. Notre choix de température correspond à $k_B T/mc^2 \simeq 0,251 \ll 1$, si bien que l'effet des phonons thermiques devrait être assez faible pour que l'équation d'état et les fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ soient proches de leurs valeurs dans l'état fondamental (l'invariance d'échelle impose $mc^2 = 2\mu/3$ dans l'expression hydrodynamique (28) de la vitesse du son)⁴⁰. Il correspond aussi à $T/T_F^{\text{dnl}} \simeq 0,067$, donc à une tempéra-

⁴⁰Les phonons changent le grand potentiel du système d'une quantité $\delta\Omega_\phi = k_B T \sum_{\mathbf{q}} \ln[1 - \exp(-\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}})]$ donc la densité du gaz de fermions grand-canonique d'une quantité

$$\begin{aligned} \delta\rho_\phi &= -\partial_\mu \delta\Omega_\phi / L^d \\ &\sim - \int_{\mathbb{R}^d} [d^d q / (2\pi)^d] \hbar(\partial_\mu c) q / [\exp(\beta\hbar c q) - 1] \\ &= -[\Omega_d / (2\pi)^d] \hbar(\partial_\mu c) (k_B T / \hbar c)^{d+1} \Gamma(d+1) \zeta(d+1) \end{aligned}$$

où la relation de dispersion $\omega_{\mathbf{q}}$ est prise linéaire (5) à suffisamment basse température $T \rightarrow 0^+$, Ω_d est l'angle total de l'espace (2π si $d = 2$, 4π si $d = 3$), Γ est la fonction Gamma d'Euler et ζ est la fonction zêta de Riemann. À 3D à la limite unitaire, nous en déduisons que

$$\delta\rho_\phi / \rho \underset{T \rightarrow 0^+}{\sim} -(\pi^4/30)(k_B T/mc^2)^4 (\xi_B/3)^{3/2}$$

avec $\xi_B = \mu/E_F$ le paramètre de Bertsch. Pour nos paramètres, ceci donne dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée $\delta\rho_\phi / \rho \simeq -6 \cdot 10^{-4} \ll 1$. Pour voir si l'équation d'état modifiée (69) donne la bonne valeur de $\delta\rho_\phi$ à basse température, supposons que l'intégrale sur $\mathbf{q}$ dans (69) soit une petite correction à ρ^{sta} ; dans ce cas, on peut écrire $\rho^{\text{dnl}} \simeq \rho^{\text{sta}} - (2/\rho^{\text{sta}}) \int_{\mathbb{R}^d} [d^d q / (2\pi)^d] \delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$. On trouve alors avec (64) que

$$\delta\rho_\phi^{\text{dnl}} = - \int_{\mathbb{R}^d} [d^d q / (2\pi)^d] (2\Phi'(0)/\rho^{\text{sta}}) q / [\exp(\beta\hbar c q) - 1];$$

vu l'expression (79) de $\Phi'(0)$, il y a accord si $\hbar\partial_\mu c = \hbar/2mc$ donc si $\partial_\mu(mc^2) = 1$. Cette condition n'est en général pas parfaitement satisfaite, sauf à 2D, voir l'équation (30). Dans le cas où ρ^{dnl} diffère significativement de ρ^{sta} , l'expression précédente de $\delta\rho_\phi^{\text{dnl}}$ doit être multipliée par $\rho^{\text{sta}}/\rho^{\text{dnl}}$ et la condition devient $(\rho^{\text{dnl}}/\rho^{\text{sta}})\partial_\mu(mc^2) = 1$, ce qui donne à 3D à la limite unitaire $(2/3)(\xi_B^{\text{sta}}/\xi_B^{\text{dnl}})^{3/2} = 1$ soit 1,19#1.

ture nettement plus basse que celle $T \simeq 0,1 T_F$ de la référence [53] mais encore supérieure à celle $T \simeq 0,05 T_F$ de la référence [54], le record dans un gaz d'atomes froids fermioniques⁴¹.

Sur la colonne de gauche de la figure 3, nous représentons les fonctions de distribution de paires réduites $g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') / \rho_\sigma \rho_{\sigma'} = 1 + \delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') / (\rho/2)^2$ en fonction de la distance adimensionnée $k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, avec $k_F = (3\pi^2 \rho)^{1/3}$ comme dans (18). La figure se place dans le point de vue d'une densité ρ fixée, comme il est dit dans la légende. Cependant, sa colonne de gauche ne dépend pas de la valeur précise de ρ choisie parce qu'elle se trouve à la limite unitaire, invariante d'échelle; de plus, comme on y a fixé le rapport $k_B T / \Delta$ ou, ce qui revient au même ici, le rapport $k_B T / \mu$, plutôt que T / T_F , nous jugeons plus commode d'en effectuer la discussion à potentiel chimique μ fixé (il en ira différemment pour la colonne de droite). Après détermination numérique des écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée grand-canonique (le gros morceau est bien entendu $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$), il faut tout de même calculer la densité ρ (et donc le nombre d'onde de Fermi k_F) pour former les quantités adimensionnées sur l'axe horizontal et l'axe vertical. La courbe en tireté correspond au choix tentant mais incorrect de l'équation d'état BCS statique $\rho = \rho^{\text{sta}}(\mu, T)$ (17), la courbe en trait plein au choix correct d'une équation d'état corrigée par les excitations collectives du superfluide, $\rho = \rho^{\text{dtl}}(\mu, T)$ (69), comme l'explique la section 2.5 (on se met dans les deux cas à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, ce qui revient formellement à prendre ρ^{sta} et la susceptibilité $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ à température nulle). Commentons brièvement ces résultats.

Dans le cas $\sigma = \sigma' = \uparrow$ (rangée du bas), la courbe en tireté est clairement catastrophiquement fautive, car elle conduit à des valeurs négatives de $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sur un voisinage de la distance nulle; or, on voit bien sur sa définition (1) que $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est positive — elle est de la forme $\langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle$ où $\hat{A}$ est un opérateur. La courbe en trait plein est bien plus convaincante : elle tend vers zéro à distance nulle, comme il se doit pour des fermions identiques $\uparrow\uparrow$ sans interaction directe, et elle reproduit l'allure générale des résultats Monte-Carlo (disques noirs). Elle en diffère cependant de manière spectaculaire par son départ linéaire en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, plutôt que quadratique dans le Monte-Carlo [56]. Comme nous le verrons dans notre section 3.3, ce départ linéaire n'est pas l'apanage de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée; il existe déjà dans la théorie BCS statique (avec une pente plus faible, il est vrai), un fait passé sous silence dans les références [56,57].

Dans le cas $\sigma = \uparrow, \sigma' = \downarrow$, la courbe en tireté, en accord acceptable avec les résultats Monte-Carlo, nous fait une fausse joie, tandis que la courbe en trait plein, avec son creux bien moins prononcé dans $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') / \rho_\uparrow \rho_\downarrow$, nous procure une certaine déception. Pour comprendre pourquoi un changement somme toute assez modeste de l'équation d'état (μ / E_F passe de 0,59 dans BCS statique à 0,40 dans BCS dépendant du temps linéarisé) affecte autant le creux, écrivons comme suit sa profondeur (comptée négativement) sur la figure 3 :

$$\min_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\rho_\uparrow \rho_\downarrow} - 1 = \frac{(3\pi^2)^2}{2} \left(\frac{\mu}{E_F} \right)^3 \min_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{(m\mu/\hbar^2)^3} \quad (96)$$

⁴¹Pour $T / T_F \simeq 0,1$ et $\xi_B \simeq 0,376$ comme dans [53], on trouve un faible effet des phonons $\delta\rho_\phi/\rho \simeq -0,0036$, voir notre note 40, mais un facteur de dissociation des paires $\exp(-\beta E_{\text{gap}}) \simeq 0,013$ a priori pas complètement négligeable. Pour en avoir le cœur net, déterminons le changement de densité $\delta\rho_\gamma$ du gaz de fermions grand-canonique dû aux quasiparticules fermioniques d'hamiltonien (9). En procédant comme dans la note 40 et en approximant $\epsilon_{\mathbf{k}}$ au voisinage de son minimum par $\epsilon_{\mathbf{k}} \simeq E_{\text{gap}} + \hbar^2(k - k_0)^2 / 2m_*$, ce qui est légitime à basse température $T \rightarrow 0^+$, nous trouvons pour $k_0 > 0$ que

$$\begin{aligned} \delta\rho_\gamma &= (-2) \int_{\mathbb{R}^d} [d^d k / (2\pi)^d] \partial_\mu \epsilon_{\mathbf{k}} / [1 + \exp(\beta \epsilon_{\mathbf{k}})] \\ &\sim -2(\partial_\mu E_{\text{gap}}) \exp(-\beta E_{\text{gap}}) k_0^{d-1} (2\pi m_* k_B T / \hbar^2)^{1/2} \Omega_d / (2\pi)^d \end{aligned}$$

où le facteur 2 global est le nombre d'états internes. À 3D à la limite unitaire, où $\partial_\mu E_{\text{gap}} = E_{\text{gap}} / \mu$ par invariance d'échelle, les valeurs mesurées $E_{\text{gap}} = 0,44 E_F$, $k_0 \simeq 0,92 k_F$ [52] et la prédiction théorique $m_* / m \simeq 0,56$ [55] donnent $\delta\rho_\gamma / \rho \simeq -1,4 \cdot 10^{-3}$ à la température de notre calcul numérique $T = 0,067 T_F$ mais $\delta\rho_\gamma / \rho \simeq -0,015$ à la température expérimentale $T = 0,1 T_F$. Dans l'expérience, ceci entraîne une surestimation du paramètre de Bertsch $\xi_B = (2m\mu/\hbar^2)/(3\pi^2\rho)^{2/3}$ de $\delta\xi_B/\xi_B = (-2/3)\delta\rho_\gamma/\rho \simeq 0,01$ en valeur relative, encore dans les barres d'erreur de la référence [53].

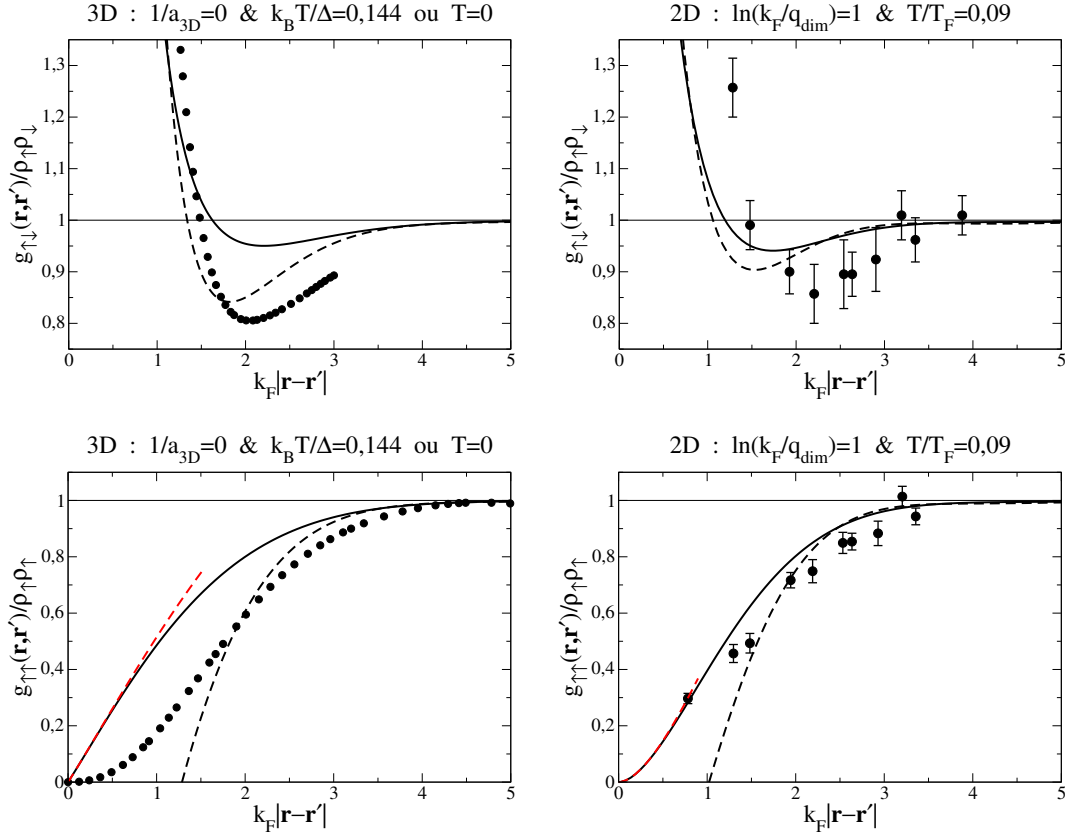


FIGURE 3. Dans un gaz spatialement homogène non polarisé de fermions de spin 1/2, fonctions de distribution de paires $g_{\uparrow\downarrow}$ (rangée du haut) et $g_{\uparrow\uparrow}$ (rangée du bas) en dimension $d = 3$ à la limite unitaire (colonne de gauche) et en dimension $d = 2$ pour une interaction de paramètre $\ln(k_F/q_{\text{dim}}) = 1$ (colonne de droite). Tireté : calcul des écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}$ des $g_{\sigma\sigma'}$ à leurs valeurs asymptotiques par la théorie BCS dépendant du temps linéarisée, puis complétion naïve (67) des $\delta g_{\sigma\sigma'}$ en les $g_{\sigma\sigma'}$ au moyen de la densité ρ^{sta} de la théorie BCS statique. Trait plein noir : même calcul des $\delta g_{\sigma\sigma'}$ dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée, mais complétion correcte (69) au moyen de la densité modifiée ρ^{dtl} dans cette théorie. Trait rouge aux courtes distances : prédictions analytiques (122) et (125) pour le départ de $g_{\uparrow\downarrow}$, toujours dans cette théorie. La densité totale $\rho = \rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow} = 2\rho_{\sigma}$ et le nombre d'onde de Fermi k_F (18) qui en découle sont considérés comme fixés sur la figure; le potentiel chimique μ dans notre théorie grand-canonique n'a donc pas même valeur pour les courbes en tireté (pour lesquelles $\rho = \rho^{\text{sta}}(\mu, T)$) et en trait plein (pour lesquelles $\rho = \rho^{\text{dtl}}(\mu, T)$). Disques noirs : résultats d'un calcul de Monte-Carlo quantique 3D par diffusion à surface nodale fixée (température nulle) [56,57] lissés par ajustement polynomial quintique pour la colonne de gauche; mesures expérimentales au moyen d'un microscope dans un gaz quasi 2D d'atomes froids [58] pour la colonne de droite (les barres d'erreur ne tiennent pas compte du biais mal connu induit par la troisième dimension). La théorie BCS dépendant du temps linéarisée est mise en œuvre à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, à 3D à une température $T = 0,144\Delta/k_B \approx 0,251mc^2/k_B$ (assez basse pour permettre une comparaison à la température nulle) et à 2D à une température $T = 0,09T_F$ (comme dans l'expérience).

où la densité a été exprimée en termes du nombre d'onde de Fermi. La valeur du minimum au second membre, fonction des seules variables thermodynamiques μ et T , plus précisément à la limite unitaire de leur rapport $k_B T/\mu$ ici fixé, est indépendante de l'équation d'état; en revanche, son préfacteur, proportionnel au cube du rapport μ/E_F , prend mécaniquement un facteur $(0,40/0,59)^3 \approx 0,31$ lorsqu'on passe du choix trop naïf $\rho = \rho^{\text{sta}}$ au bon choix $\rho = \rho^{\text{dtl}}$. La profondeur relative passe ainsi de $-0,16$ à $-0,05$, qui est la vraie prédiction de notre théorie, à comparer à $-0,2$ pour le Monte-Carlo. La même analyse montre pourquoi la position du

minimum $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|_0$ change au contraire assez peu (il est légèrement décalé vers la droite) : dans l'écriture

$$k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|_0 = \left(\frac{E_F}{\mu} \right)^{1/2} [(2m\mu/\hbar^2)^{1/2} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|_0] \quad (97)$$

la quantité entre crochets est indépendante de l'équation d'état, et le préfacteur est multiplié seulement par $(0,59/0,40)^{1/2} \simeq 1,21$ entre la courbe en tireté et la courbe en trait plein. La position réduite $k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|_0$ du minimum passe ainsi de 1,82 à 2,21, qui est la vraie prédiction de notre théorie, à comparer à 2,05 pour le Monte-Carlo.

Une autre façon de raisonner est de faire le chemin inverse, c'est-à-dire de grand-canoniser les résultats des références [56,57] en les exprimant dans l'unité de nombre d'onde grand-canonique naturelle $(m\mu/\hbar^2)^{1/2}$. Comme on a $\mu/E_F \simeq 0,42$ dans ces références, on trouve par inversion de la relation (96) que

$$\min_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{(m\mu/\hbar^2)^3} \simeq \begin{cases} -6,0 \cdot 10^{-3} & \text{dans le calcul Monte-Carlo de [56,57],} \\ -1,8 \cdot 10^{-3} & \text{dans notre théorie BCS dépendant du temps linéarisée.} \end{cases} \quad (98)$$

Le désaccord est flagrant, sans qu'il y ait à débattre de l'équation d'état, et l'accord acceptable entre la courbe en tireté et les points Monte-Carlo sur le panneau supérieur gauche de la figure 3 n'est qu'une illusion.

3.2.2. Cas bidimensionnel; comparaison aux expériences de l'ENS

En dimension $d = 2$, nous disposons de mesures expérimentales récentes des fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans un gaz spatialement homogène d'atomes froids fermioniques en interaction [58,59], aussi bien pour des spins égaux que des spins opposés, grâce à une technique de microscopie initialement mise au point pour des atomes dans un réseau optique [60-62] puis étendue avec succès à un espace continu [63] (voir la référence [64] pour les bosons). Choisissons là aussi une interaction assez forte, sinon maximale : à 2D, il n'y a pas d'équivalent strict de la limite unitaire mais on peut avoir une longueur de diffusion a_{2D} ou, si l'on préfère, une taille de dimère dans l'espace libre q_{dim}^{-1} de l'ordre de la distance moyenne entre particules; parmi les forces d'interaction disponibles dans [58], prenons donc⁴²

$$\eta \equiv \ln(k_F / q_{\text{dim}}) = 1 \quad \text{c'est-à-dire} \quad \begin{cases} \rho q_{\text{dim}}^{-2} = \frac{1}{2\pi} \exp(2\eta) \simeq 1,1760 \\ \frac{\epsilon_{\text{dim}}}{E_F} = 2 \exp(-2\eta) \simeq 0,2707 \end{cases} \quad (99)$$

où le nombre d'onde q_{dim} est relié à a_{2D} et à l'énergie de liaison du dimère ϵ_{dim} comme dans (8), et où k_F est le nombre d'onde de Fermi (18). Nous prenons la même température que dans l'expérience,

$$\frac{T}{T_F} = 0,09 \quad \text{soit} \quad \frac{k_B T}{\epsilon_{\text{dim}}} = \frac{1}{2} \exp(2\eta) \frac{T}{T_F} \simeq 0,3325. \quad (100)$$

Elle a le bon goût de conduire à un taux de dissociation thermique des paires liées $\uparrow\downarrow$ négligeable,

$$\exp(-\beta E_{\text{gap}}) \simeq 10^{-3} \quad (101)$$

si l'on se souvient de l'expression (25) du paramètre d'ordre et si l'on anticipe sur la valeur (104) du potentiel chimique, ce qui nous permet de restreindre la théorie à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$. Contrairement à la limite unitaire tridimensionnelle, la densité ρ et le nombre d'onde de Fermi k_F sont maintenant fixés par le choix (99); après adimensionnement des nombres d'onde par q_{dim} ,

⁴²La notation η reprend celle de la référence [58]; en revanche, la quantité notée a_{2D} dans cette référence n'est pas notre longueur de diffusion bidimensionnelle (7) mais plutôt la taille de dimère q_{dim}^{-1} .

des longueurs par q_{dim}^{-1} et des énergies par ϵ_{dim} , il nous faut donc résoudre numériquement l'équation

$$\rho q_{\text{dim}}^{-2} = \check{\rho}(\check{\mu} = \mu/\epsilon_{\text{dim}}, \check{T} = k_{\text{B}}T/\epsilon_{\text{dim}}) \quad (102)$$

où le signe diacritique (un accent tchèque) marque l'adimensionnement, $\check{\rho}(\check{\mu}, \check{T})$ est la fonction équation d'état réduite et $\check{\mu}$ est la seule inconnue (les autres quantités sont imposées par (99) et (100)). L'équation d'état $\rho^{\text{sta}}(\mu, T)$ de la théorie BCS statique est connue analytiquement (25), ce qui donne immédiatement

$$\check{\mu}^{\text{sta}} = \frac{1}{2} [\exp(2\eta) - 1] \simeq 3,1945. \quad (103)$$

Pour celle $\rho^{\text{dnl}}(\mu, T)$ (69) de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée, il faut calculer numériquement $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ et son intégrale sur $\mathbf{q}$ pour plusieurs valeurs du potentiel chimique; extrapolations linéaires et interpolations quadratiques donnent finalement

$$\check{\mu}^{\text{dnl}} \simeq 2,0545 \quad (104)$$

ce qui est fort différent et conduit dans l'expression (30), soit dit en passant, à $mc^2/\epsilon_{\text{dim}} \simeq 2,5545$ donc à $k_{\text{B}}T/mc^2 \simeq 0,130 \ll 1$ (l'effet des phonons thermiques est très faible, $q_{\text{dim}}^{-2} \delta \rho_{\phi} \sim [-\zeta(3)/2\pi](k_{\text{B}}T/mc^2)^3 mc^2/\epsilon_{\text{dim}} \simeq -10^{-3}$ d'après la note 40, et les points expérimentaux sont pratiquement à température nulle). Faire le choix naïf et incorrect (103) dans le calcul grand-canonique BCS dépendant du temps linéarisé des fonctions de distribution de paires conduit aux courbes en tireté sur la moitié droite de la figure 3, le choix éclairé (104) aux courbes en trait plein. Pour la fonction $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, la courbe en tireté est disqualifiée comme à 3D (elle prend des valeurs négatives), mais la courbe en trait plein — notre véritable prédiction — est en assez bon accord avec l'expérience. Pour la fonction $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, le creux du tireté a une profondeur (comptée négativement) $\min_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/\rho_{\uparrow}\rho_{\downarrow} - 1 \simeq -0,0964$ plus proche de la valeur expérimentale $\simeq -0,13$ que celle du trait plein $\simeq -0,0592$, mais une position $k_{\text{F}}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|_0 \simeq 1,53$ plus éloignée^{43,44} de la valeur expérimentale $\simeq 2,2$ que celle du trait plein $\simeq 1,738$.

3.3. Comportement des $g_{\sigma\sigma'}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à courte distance

On se souvient que les écarts aux valeurs asymptotiques $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans la théorie BCS dépendant du temps linéarisée diffèrent de ceux $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans la théorie BCS statique par une correction commune $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ indépendante des états internes σ, σ' , voir l'équation (52). Nous vérifions d'abord dans la section 3.3.1 que $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ admet une limite finie lorsque $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow 0^+$, ce qui avait été admis dans l'établissement de l'équation d'état modifiée (69) et dans la belle écriture (70) de la valeur commune des différences $g_{\sigma\sigma'}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Il en résulte que, à courte distance, la théorie BCS dépendant du temps linéarisée ne change pas le comportement divergent de $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ prédit par BCS statique au même potentiel chimique, même pas par une constante additive, voir la section 3.3.2. En revanche, comme le montre la section 3.3.3, elle modifie significativement le coefficient du départ de $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ à 3D et en $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 \ln|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ à 2D prédit par BCS statique, et fait apparaître des contributions nouvelles mais sous-dominantes en

⁴³Comme les données expérimentales sont assez bruitées sur $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, nous les remplaçons par un ajustement cubique sur l'intervalle $1,4 \leq k_{\text{F}}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \leq 3,5$ afin de déterminer la position et la valeur du minimum.

⁴⁴Nous ne reproduisons pas ici le jeu de la grand-canonisation (98) car nous ne connaissons pas bien le potentiel chimique du gaz de fermions : il n'a pas été mesuré dans la référence [58] et les valeurs qu'on pourrait tirer de la littérature théorique ou expérimentale pour une force des interactions $\eta = 1$ c'est-à-dire $\ln(k_{\text{F}}a_{2\text{D}}) \simeq 1,116$ sont fort dispersées : $\mu/E_{\text{F}} \simeq 0,43$ d'après [24, figure 3a] (approximation des fluctuations gaussiennes), $\mu/E_{\text{F}} \simeq 0,35$ par interpolation des résultats de [65, table I] (Monte-Carlo quantique à surface nodale fixée), $\mu/E_{\text{F}} \simeq 0,29$ d'après les polynômes d'interpolation de [66] (Monte-Carlo quantique à champ auxiliaire sur réseau), $\mu/E_{\text{F}} = 0,14(2)$ dans les données de [67, figure 1] (expérience d'atomes froids); à titre de comparaison, notre équation (104) correspond à $\mu/E_{\text{F}} \simeq 0,556$.

$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 \ln|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ à 3D et en $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 \ln(-\ln|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ à 2D. Pour simplifier, on se place dans la présente section 3.3 à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$.

3.3.1. Étude de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ pour $q \rightarrow +\infty$

Pour déterminer le comportement à courte distance d'une fonction définie par sa transformée de Fourier, il faut connaître le comportement de la transformée de Fourier aux grands nombres d'onde q .

Cette remarque liminaire étant faite, repartons, dans notre théorie grand-canonique BCS dépendant du temps linéarisée, de la décomposition (52) des fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, plus précisément des écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ aux valeurs asymptotiques $\rho_{\sigma}^{\text{dtl}} \rho_{\sigma'}^{\text{dtl}}$, en la somme des écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans la théorie BCS statique de même potentiel chimique μ (mais pas de même densité $\rho = 2\rho_{\sigma}$, voir l'équation (69)) et d'une unique contribution collective $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Dans la suite, nous travaillerons à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ et négligerons tous les nombres d'occupation de Fermi-Dirac $f_{\mathbf{k}}$ dans la théorie BCS statique et dans les fonctions Σ_{ij} (39)–(45) de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée.

Les écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ s'expriment, grâce au théorème de Wick, en termes des moyennes anormale et normale comme dans (19) et (20), moyennes dont les transformées de Fourier sont connues explicitement, voir les équations (21) et (22), et dont le comportement à grand nombre d'onde k s'obtient trivialement. Leur étude à courte distance sera simple à faire, surtout à 2D où on sait les écrire en termes de fonctions de Bessel (26) et (27), ce qui évite même le détour par l'espace de Fourier [1].

En revanche, la transformée de Fourier $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ de la partie collective n'a rien de simple, puisque son expression (63) utile ici (en pratique le troisième membre) est elle-même une intégrale de contour sur l'énergie complexe z d'une susceptibilité collective $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ assez rébarbative (51). Donnons tout de suite le résultat des développements asymptotiques de l'annexe B :

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \underset{q \rightarrow +\infty}{=} \begin{cases} \frac{C_{\text{coll}}}{q^4} + \frac{D_{\text{coll}}}{q^5} + O\left(\frac{1}{q^6}\right) & \text{en } d = 3, \\ \frac{C_{\text{coll}}}{q^4} \frac{\ln(A_{\text{coll}} q)}{\ln(B_{\text{coll}} q)} + O\left(\frac{\ln^{\alpha} q}{q^6}\right) & \text{en } d = 2, \end{cases} \quad (105)$$

avec les coefficients suivants :

$$d = 3 : \quad C_{\text{coll}} = -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \frac{m^2 \Delta^2}{\hbar^4} \rho^{\text{sta}}, \quad D_{\text{coll}} = -2 \left(\frac{4\pi}{9} - \frac{2\sqrt{3}}{3} \right) \frac{m^2 \Delta^2}{\hbar^4} a_{3D}^{-1} \rho^{\text{sta}} + \left(\frac{m\Delta}{\hbar^2} \right)^4 \mathcal{D}, \quad (106)$$

$$d = 2 : \quad C_{\text{coll}} = -\frac{2m^2 \Delta^2}{\hbar^4} \rho^{\text{sta}}, \quad A_{\text{coll}} = \frac{2}{\sqrt{3} q_{\text{dim}}} \neq B_{\text{coll}} = \frac{\sqrt{3}}{2 q_{\text{dim}}}. \quad (107)$$

Ici ρ^{sta} et Δ sont la densité (17) et le paramètre d'ordre (12) dans la théorie BCS statique au potentiel chimique μ , a_{3D} est la longueur de diffusion tridimensionnelle (7) et q_{dim} le nombre d'onde de dimère bidimensionnel (8). Nous donnons la constante $\mathcal{D}$ de l'équation (106) sous forme numérique,

$$\mathcal{D} = -0,549686... \quad (108)$$

et dans l'annexe B sous forme intégrale (201) ; les intégrales mises en jeu pourraient être calculées analytiquement, mais au prix d'un effort qui nous a semblé excessif. En tout cas, le point à retenir des résultats (105) est qu'ils établissent l'existence et l'expression de la limite

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow 0^+} \delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) < \infty \quad (109)$$

dans la section 2.5 et donnent donc un sens à l'équation d'état modifiée (69).

Les calculs laborieux de l'annexe B ne sont en réalité pas dénués d'intérêt, car les résultats (105) sont de prime abord assez surprenants. Cherchons en effet à les retrouver qualitativement par un argument simple de comptage de puissances q^n . Dans la limite $q \rightarrow +\infty$, l'énergie propre $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ du mode de phonon (s'il existe à grand q , voir la note 20) et le bord $E_{\text{bord}}(\mathbf{q})$ (58) du continuum de paire brisée divergent comme q^2 ; on peut donc prendre une énergie complexe z d'ordre q^2 dans le contour d'intégration C_d de l'équation (63) (ceci autorise d'ailleurs à négliger la contribution thermique $\sim \exp(-\beta z)$ exponentiellement petite, ce qui explique pourquoi les coefficients (106) et (107) ne dépendent pas de la température). On s'attend dès lors à ce que le nombre d'onde k typique dans les intégrales (39)–(45) donnant les $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ soit d'ordre q , et les énergies $\epsilon_{\pm}$ et $\xi_{\pm}$ d'ordre q^2 . D'où les lois de puissance lorsque $q \rightarrow +\infty$ à $Z = z/E_{\mathbf{q}}$ fixé (avec $E_{\mathbf{q}} = \hbar^2 q^2 / 2m$ comme dans (11)) :

$$\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z), \Sigma_{12}(\mathbf{q}, z), \Sigma_{22}(\mathbf{q}, z) \approx q^{d-2}, \quad \Sigma_{13}(\mathbf{q}, z), \Sigma_{23}(\mathbf{q}, z) \approx q^{d-4}, \quad \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) \approx q^{d-6}, \quad (110)$$

et en définitive

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \underset{q \rightarrow +\infty}{\approx} \int_{C_d} \frac{dz}{(-2i\pi)} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) \stackrel{?}{\approx} q^{d-4} \quad (111)$$

puisque $dz = E_{\mathbf{q}} dZ$. Voilà qui est en désaccord avec les résultats (105), fort heureusement d'ailleurs. Sinon, l'intégrale de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ aurait une divergence ultraviolette logarithmique à 2D, quadratique à 3D et l'équation d'état modifiée (69) n'aurait aucun sens!

Expliquons cet échec du comptage de puissances d'abord en dimension $d = 2$. Le calcul complet de l'annexe B confirme, à l'ordre dominant, que $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ est bien $\approx q^{-4}$ (à des facteurs en $\ln q$ près⁴⁵), mais chaque contribution — considérée comme une fonction de z — relève de l'un des deux cas suivants, (i) elle n'a pas de singularité (pôle ou ligne de coupure) sur le demi-axe réel positif, ou (ii) elle présente des singularités, mais seulement sur le demi-axe réel positif (en particulier, pas sur le demi-axe réel négatif). Dans le premier cas, le lacet C_d entoure un domaine d'analyticité de l'intégrande, et l'intégrale de contour $\int_{C_d} dz$ est nulle d'après le théorème de Cauchy. Dans le second cas, on peut refermer le lacet C_d par un grand cercle à l'infini, comme sur la figure 4 de même signalétique que la figure 2.

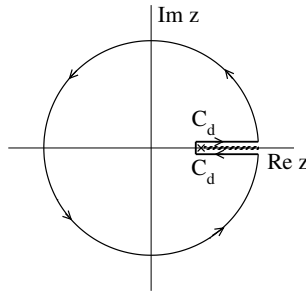


FIGURE 4. Schéma permettant d'expliquer pourquoi l'intégrale sur le lacet C_d est nulle lorsque l'intégrande est analytique en dehors du demi-axe réel positif.

⁴⁵Le logarithme $\ln q$ résulte du fait que $\int_{k < \eta q} [d^2k / (2\pi)^2] (1/\epsilon_{\mathbf{k}}) = (m/\pi\hbar^2) \ln(\eta q / q_{\text{dim}}) + O(1/q^2)$ lorsque $q \rightarrow +\infty$ à $\eta \ll 1$ fixé (on a fait usage de (25)); cette intégrale est en effet une sous-partie des Σ_{ij} , elle intervient dans leur restriction à un voisinage de $\mathbf{k}_- = \mathbf{0}$ de rayon $\ll |\mathbf{k}_+ - \mathbf{k}_-| = q$ (sur ce voisinage, on peut prendre $k_+ \approx q$).

Le contour obtenu n'entoure plus aucune singularité et l'intégrale est nulle là aussi⁴⁶. Il faut donc aller dans la susceptibilité à l'ordre suivant en q^{-1} ; comme le développement ne fait intervenir à 2D que des puissances paires, nous trouvons dans l'annexe B que

$$\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z = ZE_{\mathbf{q}}) \stackrel{Z \text{ fixé}}{q \rightarrow +\infty} \tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-4)}(Z, \ln q) q^{-4} + \tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-6)}(Z, \ln q) q^{-6} + O(q^{-8}) \quad (d = 2) \quad (112)$$

où les coefficients dépendent faiblement de q au travers de son logarithme $\ln q$. Le nouveau coefficient $\tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-6)}(Z)$ présente des singularités à la fois sur $\mathbb{R}^+$ et sur $\mathbb{R}^-$, en pratique une ligne de coupure plus un pôle sur $\mathbb{R}^-$ et un pôle sur $\mathbb{R}^+$ ou le contraire suivant le terme considéré, et son intégrale sur le lacet C_d n'est plus nulle. On aboutit à l'équation (105) pour $d = 2$.

Les mêmes considérations s'étendent à la dimension $d = 3$, si ce n'est que (i) il n'y a plus de $\ln q$ mais le développement asymptotique présente désormais des puissances de q^{-1} aussi bien paires qu'impaires⁴⁷, (ii) on part de plus loin, le terme dominant dans $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ étant d'ordre q^{-3} comme le dit justement le comptage de puissances, mais le premier terme d'intégrale non nulle sur C_d étant d'ordre q^{-6} . Comme nous allons dans (105) à l'ordre sous-dominant, nous devons connaître aussi le terme en q^{-7} dans $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$,

$$\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z = ZE_{\mathbf{q}}) \stackrel{Z \text{ fixé}}{q \rightarrow +\infty} \sum_{n=3}^7 \tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-n)}(Z) q^{-n} + O(q^{-8}) \quad (d = 3) \quad (113)$$

donc en principe déterminer les Σ_{ij} à l'ordre relatif q^{-4} ; quelques considérations habiles permettent heureusement de simplifier le calcul, voir l'annexe B. En tout cas nous trouvons que $\int_{C_d} dZ \tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-n)}(Z) = 0 \quad \forall n \in \{3; 4; 5\}$ mais $\neq 0 \quad \forall n \in \{6; 7\}$ d'où la loi asymptotique (105) à 3D (on a toujours $dz = E_{\mathbf{q}} dZ$ donc un facteur q^2 supplémentaire dans $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$).

3.3.2. Étude de $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ pour $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0^+$

Dans notre théorie BCS dépendant du temps linéarisée, déterminons à un infiniment petit près le comportement à courte distance de la fonction de distribution de paires de fermions de spins opposés. Comme la relation (70) prise pour $\sigma = \uparrow$ et $\sigma' = \downarrow$ impose

$$g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = o(1) \quad \text{lorsque} \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0^+ \quad (114)$$

nous voyons qu'il suffit pour cela de connaître celui de la fonction de distribution de paires de BCS statique $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à la même précision. Ce qui revient, après application (19) du théorème de Wick, à calculer la moyenne anormale $\langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}}$ à un $o(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ près à 3D et à un $o(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^\alpha)$ ($\alpha > 0$) près à 2D, la contribution dominante à ladite moyenne divergeant comme $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ dans le premier cas et comme $\ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ dans le second, et ladite moyenne intervenant au carré dans (19). Nous trouvons en définitive que

$$g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0^+} = \begin{cases} \frac{1}{4} \left[\rho^{\text{sta}}(\mu) \right]^2 + \left(\frac{m\Delta}{4\pi\hbar^2} \right)^2 \left[\left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{a_{3D}} \right)^2 - \frac{2m\mu}{\hbar^2} \right] + o(1) & \text{en } d = 3, \\ \frac{1}{4} \left[\rho^{\text{sta}}(\mu) \right]^2 + \left(\frac{m\Delta}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \ln^2 \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{a_{2D}} \right) + o(1) & \text{en } d = 2, \end{cases} \quad (115)$$

voir les justifications plus bas.

⁴⁶Dans ce raisonnement, on vérifie bien sûr soigneusement que l'intégrande est asymptotiquement un $O(1/|z|^\alpha)$ avec $\alpha > 1$, de façon que l'intégrale curviligne sur le grand cercle à l'infini soit nulle.

⁴⁷Le raisonnement de la note 45 donne cette fois $\int_{k < \eta q} [d^3k/(2\pi)^3] (1/\epsilon_{\mathbf{k}}) = (m/2\pi\hbar^2) [-a_{3D}^{-1} + (2/\pi)\eta q + O(1/\eta q)]$. On arrive rapidement à ce résultat en écrivant

$$\int_{k < \eta q} [d^3k/(2\pi)^3] (1/\epsilon_{\mathbf{k}}) = \int_{k < \eta q} [d^3k/(2\pi)^3] (1/E_{\mathbf{k}}) + \int_{\mathbb{R}^3} [d^3k/(2\pi)^3] (1/\epsilon_{\mathbf{k}} - 1/E_{\mathbf{k}}) - \int_{k > \eta q} [d^3k/(2\pi)^3] (1/\epsilon_{\mathbf{k}} - 1/E_{\mathbf{k}})$$

et en utilisant l'équation (12) sur le paramètre d'ordre. En dehors de la limite unitaire, ceci suffit à expliquer la coexistence de puissances paires et impaires de q^{-1} .

On reconnaît dans ces expressions (115) le carré de la fonction d'onde à deux corps $\psi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de l'équation (7) : comme on pouvait s'y attendre, la fonction de distribution de paires $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ reproduit à courte distance la structure en densité de l'état stationnaire de diffusion de deux fermions $\uparrow$ et $\downarrow$ à énergie nulle. À un facteur numérique près, le préfacteur de $|\psi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2$ est appelé coefficient de contact $\mathcal{C}$, ou simplement « contact » dans la littérature anglo-américaine⁴⁸, et a fait l'objet d'une abondante littérature le plaçant au cœur de plusieurs relations exactes entre différentes observables, voir les références fondatrices [69] à 1D et [70] à 3D. On sait que la valeur $\mathcal{C}^{\text{sta}} \propto (m\Delta/\hbar^2)^2$ prédite par la théorie BCS dans (115) n'est qu'une minoration de la valeur exacte $\mathcal{C}$, voir [71, section V.K], et qu'elle devient catastrophiquement mauvaise dans la limite BCS. Ainsi, à 3D où, dans cette limite, $k_F \rightarrow 0^+$ à longueur de diffusion $a_{3D} \in]-\infty, 0[$ fixée, $\mathcal{C}^{\text{sta}}(T=0)$ tend comme Δ exponentiellement rapidement vers zéro avec $1/k_F$, alors que la valeur exacte s'annule algébriquement, $\mathcal{C}(T=0) \sim (2\pi\rho a_{3D})^2$ [72]. Pour remédier à cette insuffisance, la référence [73] tient compte des fluctuations quantiques et thermiques du champ d'appariement — absentes de BCS statique — au moyen de diagrammes en échelle bien choisis dans la matrice T à N corps⁴⁹; l'expression de $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ qui en résulte, une intégrale sur les vecteurs d'onde $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}$ et une somme sur les pulsations de Matsubara associées ω, ω', Ω , voir [73, équation (20)], comporte dans son intégrande une partie collective de même dénominateur $\Sigma_{11}(\mathbf{q}, i\hbar\Omega)\Sigma_{22}(\mathbf{q}, i\hbar\Omega) - \Sigma_{12}^2(\mathbf{q}, i\hbar\Omega)$ que dans notre théorie BCS dépendant du temps linéarisée; une différence importante est cependant que son facteur de phase de Fourier $\exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]$ fait intervenir les vecteurs d'onde internes $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ plutôt que le vecteur d'onde $\mathbf{q}$ du centre de masse des paires liées $\uparrow\downarrow$ mises en mouvement par les ondes sonores, comme $\exp[i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] dans le théorème de fluctuation-dissipation (36). Il en résulte une meilleure description de $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à courte distance mais une moins bonne description de $\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à grande distance; en particulier, la prédiction (20) de [73] viole la relation sommatoire (6) de notre section 1 alors que la nôtre $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ y souscrit parfaitement, voir [73, figure 14] et notre annexe A.3.$

À 3D, pour obtenir (115), il a suffi d'effectuer quelques manipulations sur la représentation de Fourier (21) de la moyenne anormale, écrite ici à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ comme nous l'avons dit,

$$\begin{aligned} \langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{sta}} &= - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\frac{\Delta}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \right) \\ &\quad - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\frac{\Delta}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \right) (e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} - 1) \quad (116) \\ &\stackrel{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow 0^+}{=} - \frac{m\Delta}{4\pi\hbar^2} \left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - \frac{1}{a_{3D}} \right) + \frac{m^2\mu\Delta}{4\pi\hbar^4} |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| [1 + o(1)] \end{aligned}$$

Dans la deuxième égalité, nous nous sommes souvenu de l'équation (12) sur le paramètre d'ordre Δ et de la transformée de Fourier inverse de $1/k^2$, $\int_{\mathbb{R}^3} [d^3k/(2\pi)^3] (1/k^2) \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] = 1/4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$, puis nous avons pu appliquer le théorème (221) de l'annexe C à la troisième intégrale du second membre car $(2\epsilon_{\mathbf{k}})^{-1} - (2E_{\mathbf{k}})^{-1} = C/k^4 + O(1/k^6)$ lorsque $k \rightarrow +\infty$, avec $C = 2m^2\mu/\hbar^4$. Une simple élévation au carré donne (115) en dimension $d=3$, ce qui est bien (qualitativement, avec des coefficients non exacts) de la forme générale attendue pour un gaz de fermions de spin 1/2 en interaction de contact, voir [68, relation (3a) de la table V], écrite elle aussi à un $o(1)$ près.

À 2D, il a suffi de reporter les développements connus des fonctions de Bessel $K_0(x) = -\ln(xe^\gamma/2) + O(x^2 \ln x)$ ($\gamma = 0,577\dots$ est la constante d'Euler–Mascheroni) et $J_0(x) = 1 + O(x^2)$ dans l'expression analytique (26) de la moyenne anormale, puis de relier q_{dim} à la longueur de diffusion bidimensionnelle comme dans (8) pour obtenir (115) en dimension $d=2$, ce qui est

⁴⁸La convention de [68] est que $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim \mathcal{C}/(4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)^2$ à 3D et $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim [\mathcal{C}/(2\pi)^2] \ln^2(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/a_{2D})$ à 2D, auquel cas on a la relation exacte $\hbar^2 L^d \mathcal{C}/m = 4\pi \partial_{(-1/a_{3D})} \Omega(\mu, T)$ ($d=3$) ou $2\pi \partial_{\ln a_{2D}} \Omega(\mu, T)$ ($d=2$) avec $\Omega(\mu, T)$ le grand potentiel.

⁴⁹Nous remercions Pierbiagio Pieri d'avoir attiré notre attention sur cette référence.

malheureusement en désaccord (même qualitatif) avec [68, relation (3b) de la table V] : celle-ci affirme en toute généralité que l'on a, pour des interactions de contact,

$$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \stackrel{d=2}{=} \frac{\mathcal{C}}{(2\pi)^2} \ln^2 \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{a_{2D}} \right) + O(r^2 \ln^2 r) \quad (117)$$

où $\mathcal{C}$ est le coefficient de contact exact, ici pour le gaz bidimensionnel ; il ne devrait donc pas y voir de terme constant non nul dans (115) pour $d = 2$.

Par souci d'exhaustivité, demandons-nous dans quelle mesure nous aurions pu obtenir les lois (115) sans passer par la moyenne anormale mais en travaillant directement sur la représentation de Fourier de $\delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ au sens de (53). Le développement à grand q de l'intégrale sur le vecteur d'onde interne $\mathbf{k}$ donnant $\delta \tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ dans (56) n'est pas complètement trivial : il ne suffit pas, après la mise à l'échelle évidente $\mathbf{k} = q\mathbf{K}$, de développer l'intégrande en puissances de q^{-1} à $\mathbf{K}$ fixé, car ceci fait apparaître une singularité en $\mathbf{K} = \mp \hat{\mathbf{q}}/2$ ($\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/q$ est la direction de $\mathbf{q}$) suffisamment sévère à 2D pour n'être pas intégrable (on a en effet $\epsilon_{\pm} \sim E_{\mathbf{q}}(\mathbf{K} \pm \hat{\mathbf{q}}/2)^2$). Le voisinage des singularités $k_{\pm} < \eta q$, $\eta \ll 1$, doit en réalité être traité à part, en développant l'intégrande en puissances de q à $\mathbf{k}_{\pm}$ fixé, même en dimension $d = 3$. Nous renvoyons le lecteur à [5, section 4.3.5.4], et donnons ici directement le résultat⁵⁰ :

$$\delta \tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}) \stackrel{q \rightarrow +\infty}{=} \begin{cases} \frac{m^2 \Delta^2}{8\hbar^4 q} - \frac{m^2 \Delta^2}{2\pi \hbar^4 a_{3D} q^2} + O\left(\frac{1}{q^4}\right) & \text{en } d = 3, \\ \frac{m^2 \Delta^2}{\pi \hbar^4 q^2} \ln\left(\frac{q}{q_{\text{dim}}}\right) + O\left(\frac{\ln^\alpha q}{q^4}\right) & \text{en } d = 2. \end{cases} \quad (118)$$

Une transformation de Fourier inverse redonne (115) mais seulement à des constantes additives inconnues près, celles provenant du $O(1/q^4)$ négligé⁵¹. Il serait difficile d'aller au-delà.

3.3.3. Étude de $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ pour $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0^+$

Déterminons maintenant à l'ordre quadratique le comportement à courte distance de la fonction de distribution de paires de fermions de même spin $\uparrow$ dans notre théorie BCS dépendant du temps linéarisée. À cette fin, spécialisons la relation (70) au cas $\sigma = \sigma' = \uparrow$,

$$g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) [e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} - 1] \quad (119)$$

et écrivons la moyenne normale (22) intervenant dans l'expression de Wick (20) de $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sous une forme de Fourier similaire (ici à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, après multiplication haut et

⁵⁰L'intégrale sur le complémentaire du voisinage, $k_{\pm} > \eta q$ ou plutôt $K_{\pm} \equiv |\mathbf{K} \pm \hat{\mathbf{q}}/2| > \eta$ puisqu'on y a mis $\mathbf{k}$ à l'échelle, est souvent difficile à calculer, comme l'avait remarqué la référence [5]. À 3D, on tombe sur $I_{3D} = \int_0^{+\infty} dK_- \int_0^{\theta_m(K_-)} \sin \theta d\theta / (1 + 2K_- \cos \theta + K_-^2)$ où $\theta_m(K) = \arccos(\max(-1, -1/2K))$; le calcul formel donne un résultat explicite $I_{3D} = [2\pi^2 - 6\ln^2 2 + \ln 3 \ln(64/27) - 3g_2(1/4) - 6g_2(1/3)]/6$ en termes de la fonction de Bose ou dilogarisme $g_2(z)$; des relations connues sur $g_2(z)$ nous ont permis de montrer qu'on a plus simplement $I_{3D} = \pi^2/4$. À 2D, on tombe sur la partie difficile $I_{2D} = \int_{1/2}^{+\infty} (dK_- / K_-) \int_{-\theta_m(K_-)}^{+\theta_m(K_-)} d\theta / (1 + 2K_- \cos \theta + K_-^2)$; en calculant dans la limite $\eta \rightarrow 0^+$ l'intégrale auxiliaire $J = \int_{\mathbf{K} \cdot \hat{\mathbf{q}} > 0} d^2 K / \{[(\mathbf{K} + \hat{\mathbf{q}}/2)^2 + \eta^2][(\mathbf{K} - \hat{\mathbf{q}}/2)^2 + \eta^2]\}$ de deux façons différentes, en variable $\mathbf{K}$ — intégrer sur le demi-espace $\mathbf{K} \cdot \hat{\mathbf{q}} > 0$ revenant alors plus simplement à intégrer sur l'espace tout entier et à diviser le résultat par 2 — puis en variable $\mathbf{K}_-$, on trouve que $J = -2\pi \ln \eta + o(1)$ puis que $J = -\pi \ln 3 + I_{2D} - 2\pi \ln \eta + o(1)$, d'où $I_{2D} = \pi \ln 3$.

⁵¹À 3D, on régularise la transformée de Fourier inverse (TFI) de $1/q$ par l'habituel facteur $\exp(-\eta q)$ où $\eta \rightarrow 0^+$, pour obtenir $\text{TFI}(1/q) = 1/2\pi^2 r^2$ en prenant $\mathbf{r}' = \mathbf{0}$ pour abrégier. À 2D, on introduit comme intermédiaire la fonction d'onde du dimère $\phi_{\text{dim}}(\mathbf{r})$, dont la transformée de Fourier (TF) est connue, $\tilde{\phi}_{\text{dim}}(\mathbf{k}) = 2\pi^{1/2} q_{\text{dim}} / (k^2 + q_{\text{dim}}^2)$. Ceci permet de calculer analytiquement la TF de la densité de probabilité du dimère, $\tilde{\rho}_{\text{dim}}(\mathbf{q}) = \text{TF}[\phi_{\text{dim}}^2(\mathbf{r})] = \ln[1 + Z + Y(Y + 4 + Z)/2]/Z$ avec $Z = \sqrt{Y(Y + 4)}$ et $Y = q^2/q_{\text{dim}}^2$; on vérifie alors que $\tilde{\rho}_{\text{dim}}(\mathbf{q}) = 2 \ln Y/Y + O(\ln Y/Y^2) = 4 \ln(q/q_{\text{dim}})/(q^2/q_{\text{dim}}^2) + O(\ln q/q^4)$ lorsque $q \rightarrow +\infty$. Or, $\phi_{\text{dim}}(\mathbf{r}) = (q_{\text{dim}}/\pi^{1/2}) K_0(q_{\text{dim}} r) = (q_{\text{dim}}/\pi^{1/2}) [-\ln(r/a_{2D})] + O(r^2 \ln r)$ lorsque $r \rightarrow 0^+$, ce qui permet de conclure.

bas par la quantité conjuguée $\epsilon_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}}$ pour faire apparaître un numérateur constant sous le signe intégral) :

$$g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \left\{ \rho^{\text{sta}} + \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{2\epsilon_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}})} [e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} - 1] \right\} \times \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{2\epsilon_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}})} [e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} - 1] \quad (120)$$

Pour développer ces expressions à l'ordre $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2$, on peut utiliser les mêmes théorèmes (216) et (221) de l'annexe C — initialement pensés pour (119) — puisque l'intégrande de (120) décroît lui aussi comme l'inverse du nombre d'onde à la puissance quatre; comme le montrera l'équation (129), l'analogie avec (105) est complète si l'on pose en dimension quelconque

$$C_{\text{sta}} \stackrel{\forall d}{=} -\frac{m^2 \Delta^2}{\hbar^4} \rho^{\text{sta}}. \quad (121)$$

Aussi serons-nous bref.

En dimension $d = 3$, nous obtenons le développement

$$g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dnl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \stackrel{d=3}{\underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow 0^+}{=}} -\frac{1}{8\pi} (C_{\text{sta}} + C_{\text{coll}}) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + \frac{1}{6} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \left[\mathcal{B}_{\text{sta}} + \mathcal{B}_{\text{coll}} + \frac{D_{\text{coll}}}{2\pi^2} \ln(k_{\Delta} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + o(1) \right] \quad (122)$$

avec le nombre d'onde $k_{\Delta} = (m\Delta/\hbar^2)^{1/2}$ et les quantités suivantes, provenant de la théorie BCS statique (indice « sta ») ou de la partie collective de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée (indice « coll ») :

$$\mathcal{B}_{\text{sta}} \stackrel{d=3}{=} \frac{3k_0 C_{\text{sta}}}{8\pi} - 6 \left(\frac{C_{\text{sta}}}{8\pi \rho^{\text{sta}}} \right)^2 + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} k^2 \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \rho^{\text{sta}} + \frac{C_{\text{sta}}}{(k^2 + k_0^2)^2} \right], \quad (123)$$

$$\mathcal{B}_{\text{coll}} \stackrel{d=3}{=} \frac{3q_0 C_{\text{coll}}}{8\pi} + \frac{D_{\text{coll}}}{2\pi^2} \left(-\frac{13}{12} + \gamma + \ln \frac{q_0}{k_{\Delta}} \right) - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} q^2 \left[\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) - \frac{C_{\text{coll}}}{(q^2 + q_0^2)^2} - \frac{q D_{\text{coll}}}{(q^2 + q_0^2)^3} \right]. \quad (124)$$

Rappelons que $\gamma = 0,577215\dots$ est la constante d'Euler-Mascheroni et que les coefficients C_{coll} et D_{coll} sont donnés dans l'équation (106). Par construction, les quantités (123) et (124) ne dépendent pas des nombres d'onde arbitraires k_0 ou $q_0 > 0$ (on peut s'en convaincre en vérifiant que leurs dérivées par rapport à k_0 ou q_0 sont identiquement nulles). À la limite unitaire, nous trouvons numériquement que $\mathcal{B}_{\text{sta}} \approx 5,07 \cdot 10^{-3} k_{\Delta}^8$ et que $\mathcal{B}_{\text{coll}} \approx -1,29 \cdot 10^{-2} k_{\Delta}^8$, ce qui est utile pour le panneau inférieur gauche de la figure 3 — la loi (122) y est représentée en rouge. Il mérite d'être souligné que le départ linéaire de $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ n'est pas propre à la théorie BCS dépendant du temps linéarisée; il préexiste dans la théorie BCS statique, il est vrai avec une pente significativement plus faible puisque $C_{\text{coll}}/C_{\text{sta}} = 4\pi/3\sqrt{3} \approx 2,42$ indépendamment de la force des interactions. Le départ linéaire est donc significativement renforcé mais pas créé par les excitations collectives. En revanche, la contribution en $\ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ dans le coefficient du terme quadratique est une nouveauté, provenant du terme en $1/q^5$ (105) dans $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ à grand q , absent de $\delta \tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ comme nous le verrons dans l'équation (129).

En dimension $d = 2$, nous obtenons le développement

$$g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \stackrel{d=2}{\underset{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow 0^+}{\sim}} \frac{1}{4} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \left\{ \mathcal{B}_{\text{sta}} + \mathcal{B}_{\text{coll}} + \frac{C_{\text{sta}} + C_{\text{coll}}}{2\pi} [\ln(q_{\text{dim}} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/2) + \gamma - 1] - \frac{C_{\text{coll}}}{2\pi} \ln\left(\frac{A_{\text{coll}}}{B_{\text{coll}}}\right) \ln(-\ln(q_{\text{dim}} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)) + o(1) \right\}. \quad (125)$$

Comme précédemment, l'indice des coefficients indique leur provenance, « sta » pour la théorie BCS statique et « coll » pour la partie collective de BCS dépendant du temps linéarisé. Il nous a fallu introduire les quantités

$$\mathcal{B}_{\text{sta}} \stackrel{d=2}{=} \frac{C_{\text{sta}}}{2\pi} \ln\left(\frac{k_0}{q_{\text{dim}}}\right) + \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left[\frac{k^2}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}}\right) \rho^{\text{sta}} + \frac{C_{\text{sta}}}{k^2 + k_0^2} \right] = \frac{C_{\text{sta}}}{2\pi} \left(\frac{1}{2} - \frac{\pi \rho^{\text{sta}}}{2q_{\text{dim}}^2} \right), \quad (126)$$

$$\mathcal{B}_{\text{coll}} \stackrel{d=2}{=} \frac{C_{\text{coll}}}{2\pi} \left[\ln\left(\frac{q_0}{q_{\text{dim}}}\right) + \ln\left(\frac{A_{\text{coll}}}{B_{\text{coll}}}\right) \ln(\ln(B_{\text{coll}} q_0)) \right] - \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \left[q^2 \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) - \frac{C_{\text{coll}}}{q^2 + q_0^2} \frac{\ln[A_{\text{coll}}^2(q^2 + q_0^2)]}{\ln[B_{\text{coll}}^2(q^2 + q_0^2)]} \right], \quad (127)$$

faisant intervenir les coefficients A_{coll} , B_{coll} et C_{coll} de l'équation (107). Indépendantes du nombre d'onde $k_0 > 0$ ou du nombre d'onde q_0 pourvu qu'on ait $q_0 > 1/B_{\text{coll}}$, ces quantités (126) et (127) sont les équivalents bidimensionnels de (123) et (124), d'où la notation à l'identique. Nous avons donné l'expression explicite très simple de $\mathcal{B}_{\text{sta}}$ (à 3D, elle ferait apparaître des intégrales elliptiques)⁵². Pour une force des interactions $\ln(k_{\text{F}}^{\text{dl}}/q_{\text{dim}}) = 1$, nous trouvons numériquement que $\mathcal{B}_{\text{coll}} \simeq -0,291 q_{\text{dim}}^6$, ce qui nous a permis de représenter (125) en rouge sur le panneau inférieur droit de la figure 3. Il y avait déjà dans BCS statique une contribution logarithmique au coefficient du terme quadratique; elle est quand même triplée dans BCS dépendant du temps linéarisée, puisque $C_{\text{coll}} = 2C_{\text{sta}}$. Au contraire, la contribution en double logarithme est une nouveauté, due aux facteurs logarithmiques dans la queue en $1/q^4$ (105) de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$, absents de $\delta \tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ comme nous le verrons dans l'équation (129).

Par souci d'exhaustivité et de symétrie entre $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ et $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, voyons dans quelle mesure nous pouvons développer $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à courte distance sans passer par la moyenne normale (22) mais en appliquant directement les théorèmes de l'annexe C à sa représentation intégrale, qui tient compte automatiquement de sa limite nulle à distance nulle :

$$g_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \delta \tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}) [e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} - 1] \quad (128)$$

où la transformée de Fourier $\delta \tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ est donnée par l'équation (57). Par la même méthode que celle ayant conduit à (118), nous trouvons indépendamment de la dimension que

$$\delta \tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}) \stackrel{\forall d}{\underset{q \rightarrow +\infty}{\sim}} \frac{C_{\text{sta}}}{q^4} + O\left(\frac{1}{q^6}\right). \quad (129)$$

L'introduction du coefficient C_{sta} avait été anticipée par l'équation (121). Pour le reste, la théorie BCS statique est plus pauvre aux grands nombres d'onde que la théorie BCS dépendant du temps linéarisée au sens où, dans les notations des lois asymptotiques (105) sur $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$, la loi (129) correspond en dimension $d = 3$ à un coefficient $D_{\text{sta}} = 0$ (pas de contribution sous-dominante en $1/q^5$) et en dimension $d = 2$ à des coefficients égaux $A_{\text{sta}} = B_{\text{sta}}$ (pas de facteurs logarithmiques

⁵²L'application directe des résultats de l'annexe C à la fonction $\delta \tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ de l'équation (57) écrite à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ conduirait compte tenu de (129) à

$$\mathcal{B}_{\text{sta}} = (C_{\text{sta}}/2\pi) \ln(q_0/q_{\text{dim}}) - \int_{\mathbb{R}^2} [d^2 q / (2\pi)^2] [q^2 \delta \tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}) - C_{\text{sta}}/(q^2 + q_0^2)],$$

expression indépendante de $q_0 > 0$ et en principe équivalente, mais nettement plus difficile à calculer (nous y sommes cependant parvenu) ; la même remarque pourrait être faite à 3D.

dans le terme dominant $1/q^4$)⁵³. L'application des théorèmes redonne en tout cas directement les contributions comprenant un facteur C_{sta} dans (122) et (125) mais conduit à des expressions des $\mathcal{B}_{\text{sta}}$ peu utilisables en pratique car difficiles à intégrer, voir la note 52.

4. Conclusion générale

Nous avons étudié à basse température les fonctions de distribution de paires $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ d'un gaz bidimensionnel ou tridimensionnel de fermions de spin 1/2 en interaction de contact, non polarisé et spatialement homogène, dans ce qui nous paraît être la théorie de champ moyen minimale acceptable pour leur calcul, la théorie BCS dépendant du temps linéarisée, dont les fonctions de réponse densité-densité $\chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ déduites d'une dynamique de champ classique conduisent à des prédictions entièrement quantiques sur les $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ par la grâce du théorème de fluctuation-dissipation. En revanche, la théorie BCS statique, qui ignore totalement les excitations collectives, en particulier la branche acoustique — et donc les phonons — de Bogolioubov–Anderson, est disqualifiée. L'étude est menée dans l'ensemble grand-canonique de potentiel chimique μ et de température T , et la densité du gaz à l'équilibre s'en déduit par l'équation d'état $\rho(\mu, T)$.

L'insuffisance la plus criante de BCS statique apparaît dans la fonction de distribution de paires de fermions de spins opposés $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ et son écart $\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à sa valeur asymptotique $[\rho(\mu, T)/2]^2$: cette théorie décrit en fait seulement la structure spatiale d'une paire liée $\uparrow\downarrow$ du condensat de paires, puisque $\delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est proportionnelle à $|\phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2$ avec $\phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ la fonction d'onde d'une paire liée, voir la section 1 ; ainsi $\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ serait une fonction partout positive, tendant de façon monotone vers zéro, avec une constante de décroissance exponentielle κ_0 de limite non nulle à température nulle, voir la note 2. La théorie BCS dépendant du temps linéarisée montre que, sous l'effet des fluctuations quantiques ou thermiques dans les modes de phonons, la réalité est bien différente : à basse température,

- (i) la fonction $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dfl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ admet un minimum absolu strictement inférieur à sa valeur asymptotique, un creux donc, avec une profondeur assez proche de celle du Monte-Carlo quantique de la référence [56] pour le gaz unitaire à 3D, et de celle dans l'expérience de la référence [58] à 2D pour une force des interactions $\ln(k_F/q_{\text{dim}}) = 1$, si l'on utilise l'équation d'état BCS statique $\rho^{\text{sta}}(\mu, T)$ pour passer de $\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$; l'accord se dégrade cependant, de façon catastrophique à 3D, si l'on utilise — comme il se doit en principe — l'équation d'état modifiée sous l'effet des modes collectifs d'excitation $\rho^{\text{dfl}}(\mu, T)$, voir la section 3.2 ; ceci résulte d'une absence d'autocohérence de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée ;

⁵³La situation est plus simple que celle de $\delta \tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ (voir la note 50 et le texte qui l'appelle) car la fonction $1 - \xi_{\mathbf{k}}/\epsilon_{\mathbf{k}} = \Delta^2/\epsilon_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}})$ est d'intégrale convergente sur $\mathbb{R}^d$ même pour $d = 3$; l'intégrale sur $\mathbf{k}$ définissant $\delta \tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q})$ dans (57) est alors dominée aux grands q par des voisinages de $\mathbf{k}_{\pm} = \mathbf{0}$ de rayon ηq , $\eta \ll 1$ fixé : on peut remplacer $\mathbf{k}_{\mp}$ par $\mp \mathbf{q}$ dans le reste de l'intégrande et on sort une loi en q^{-4} . Par comptage de puissances, on vérifie en effet que le domaine d'intégration $k_{\pm} \approx q$ donne une contribution sous-dominante en $O(q^{d-8})$ (on fait le changement de variable $\mathbf{k} = q\mathbf{K}$ puis on passe à la limite $q \rightarrow +\infty$ à $\mathbf{K}$ fixé). Cet argument suffit à montrer que $D_{\text{sta}} = 0$ à 2D, mais pas à 3D ($3 - 8 = -5$). Pour $d = 3$, il faut faire le calcul complet, l'annulation de D_{sta} résultant d'une compensation subtile entre la zone de proximité k_+ ou $k_- < \eta q$ et la zone asymptotique complémentaire k_+ et $k_- > \eta q$. Mathématiquement, ceci provient du fait a priori non évident qu'une certaine expression intégrale $I(\eta)$ est de limite nulle lorsque le paramètre de coupure $\eta < 1/2$ séparant les deux zones tend vers 0^+ , à savoir

$$I(\eta) = -2\eta^{-1} + \int_{\eta}^{+\infty} (dK_-/K_-^2) \int_0^{\theta_m(K_-)} (\sin \theta d\theta)/(K_-^2 + 2K_- \cos \theta + 1)^2 = -\eta/(1 - \eta^2) - 3 \operatorname{argth} \eta$$

où l'angle $\theta_m(K)$ est défini dans la note 50 (le terme $-2\eta^{-1}$ provient de la zone de proximité, le reste de la zone asymptotique).

- (ii) la fonction $\delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ tend vers zéro à l'infini par valeurs strictement négatives, avec une constante de décroissance exponentielle $\kappa_0 \sim 2\pi k_B T / \hbar c$ où c est la vitesse du son; à température nulle, $\delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ tend vers zéro comme l'inverse de la distance $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ à la puissance $d + 1$ où $d \in \{2; 3\}$ est la dimension de l'espace, là aussi par valeurs strictement négatives.

Dans la limite $T \rightarrow 0^+$ et $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow +\infty$, la section 3.1 donne plus précisément un approximant original de $\delta g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sous forme d'une série partout négative raccordant le régime asymptotique quantique $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll \hbar c / 2\pi k_B T$, où le système semble être dans son état fondamental, au régime asymptotique thermique $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \hbar c / 2\pi k_B T$. À une renormalisation près de la densité et de la vitesse du son, l'approximant est en accord avec l'hydrodynamique quantique de Landau et Khalatnikov, une théorie effective de basse énergie que l'on pense être exacte à l'ordre dominant en température. Il vaut aussi pour $\delta g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, qui est équivalent à $\delta g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ aux distances beaucoup plus grandes que la taille d'une paire liée. En revanche, à courte distance $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0^+$, le comportement — divergeant bien entendu vers $+\infty$ — de $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ reste le même que celui de $g_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ au même potentiel chimique, l'écart n'étant qu'un $o(1)$, voir la section 3.3, ce qui constitue une limitation de la théorie.

En ce qui concerne la fonction $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ prise à courte distance, l'écart entre BCS statique et BCS dépendant du temps linéarisé de même potentiel chimique est seulement quantitatif à l'ordre dominant en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$: à 3D, les coefficients du départ linéaire $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ diffèrent par un facteur $1 + 4\pi/3\sqrt{3} \simeq 3,4$; à 2D, ceux du départ logarithmico-quadratique $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ diffèrent par un facteur 3. Les coefficients les plus faibles sont ceux de BCS statique, et les rapports donnés valent indépendamment de la force des interactions. Les différences qualitatives apparaissent à l'ordre sous-dominant, la théorie BCS dépendant du temps linéarisée comportant des termes en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ à 3D et en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \ln(-\ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ à 2D, totalement absents de BCS statique, voir la section 3.3. Là aussi, il faut utiliser l'équation d'état modifiée dans le calcul de $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, le théorème de fluctuation-dissipation donnant seulement les écarts $\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Le changement d'équation d'état de $\rho^{\text{sta}}(\mu, T)$ en $\rho^{\text{dtl}}(\mu, T)$ est cette fois bienvenu : au lieu de dégrader l'accord avec la théorie ou l'expérience, il permet d'éviter une absurdité, celle de valeurs de $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{dtl}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ strictement négatives sur un voisinage de la distance nulle! Il ne règle cependant pas un net désaccord avec le Monte-Carlo quantique sur le gaz unitaire à 3D, selon lequel le départ de $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est quadratique plutôt que linéaire, voir la section 3.2.

Le présent article n'est qu'une première incursion dans le sujet des fonctions de distribution de paires des gaz de fermions. Il pose les bases de la théorie BCS minimale acceptable mais laisse en suspens deux questions importantes :

- (i) une comparaison à une théorie plus élaborée à base d'intégrale de chemin sur un champ bosonique auxiliaire (après sommation sur les degrés de liberté fermioniques), prise dans l'approximation dite des fluctuations gaussiennes [25,32];
- (ii) un calcul explicite à tous les ordres en le facteur de dissociation thermique des paires liées $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, en particulier au voisinage de la transition superfluide, dont on peut se demander si elle laisse une empreinte observable dans les fonctions de distribution de paires, par exemple à 3D au travers d'une atteinte exponentielle de leurs valeurs asymptotiques de plus en plus lente lorsque $T \rightarrow T_c$, comme c'est le cas pour la condensation de Bose-Einstein du gaz parfait⁵⁴.

L'article nous a semblé assez long pour que la résolution de ces questions soit remise à plus tard.

⁵⁴Mathématiquement, nous n'excluons pas que, dans le cas des fermions, cette relaxation exponentielle soit oscillante, c'est-à-dire de la forme $\exp(ik_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ plus complexe conjugué avec une partie réelle $\text{Re } k_0$ non infinitésimale mais une partie imaginaire $\kappa_0 = \text{Im } k_0 > 0$ tendant vers zéro à la transition.

Note. Lors de la relecture des épreuves, nous avons eu connaissance de la prépublication très récente de N. Kaschewski, A. Pelster et C. A. R. Sá de Melo [74], qui effectue un calcul numérique des fonctions de distribution de paires à 2D à température nulle dans l'approximation des fluctuations gaussiennes.

Déclaration d'intérêts

L'auteur ne travaille pas, ne conseille pas, ne possède pas de parts, ne reçoit pas de fonds d'une organisation qui pourrait tirer profit de cet article, et n'a déclaré aucune autre affiliation que ses organismes de recherche.

Annexe A. Développement à faible q de $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$

À l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ (les nombres d'occupation de Fermi-Dirac sont mis à zéro), l'équation (64) sépare la transformée de Fourier $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ de la partie collective des fonctions de distribution de paires en la contribution $\Phi(\mathbf{q})(\bar{n}_{\mathbf{q}} + 1/2)$ du mode de phonon et la contribution $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}^{C^0}(\mathbf{q})$ du continuum de paire brisée, en décomposant le chemin d'intégration sur l'énergie complexe z en un cercle c_d entourant le pôle de phonon $z = \hbar\omega_{\mathbf{q}}$ et un lacet L_d entourant la ligne de coupure $z \in [E_{\text{bord}}(\mathbf{q}), +\infty[$ du continuum, voir la figure 2(c). Ici, nous déterminons le comportement des fonctions $\Phi(\mathbf{q})$ et $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}^{C^0}(\mathbf{q})$ à faible nombre d'onde q ; rappelons que, dans cette limite, l'existence du mode de phonon est garantie, voir la note 20.

A.1. Ce que donne le continuum de paire brisée

Commençons par la contribution du continuum de paire brisée et partons de l'expression (51) de la susceptibilité collective $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$. Comme le lacet L_d reste à distance non infinitésimale des singularités sur l'axe réel, nous pouvons développer les fonctions $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ en puissances de q à z fixé, ce qui ne fait intervenir que des puissances paires (les intégrandes sont des fonctions lisses et paires du vecteur d'onde $\mathbf{q}$) :

$$\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z) \stackrel{z \text{ fixé}}{\underset{q \rightarrow 0^+}{\equiv}} \Sigma_{ij}^{(0)}(z) + q^2 \Sigma_{ij}^{(2)}(z) + O(q^4). \quad (130)$$

On remarque que les ordres zéro ne font intervenir que deux fonctions indépendantes :

$$\sigma_0(z) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}}(z^2 - 4\epsilon_{\mathbf{k}}^2)}, \quad \sigma_1(z) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}(z^2 - 4\epsilon_{\mathbf{k}}^2)}. \quad (131)$$

On a en effet

$$\Sigma_{11}^{(0)}(z) = \frac{1}{2} z^2 \sigma_0(z), \quad \Sigma_{22}^{(0)}(z) = \frac{1}{2} (z^2 - 4\Delta^2) \sigma_0(z), \quad \Sigma_{12}^{(0)}(z) = z \sigma_1(z), \quad (132)$$

$$\Sigma_{13}^{(0)}(z) = z \Delta \sigma_0(z), \quad \Sigma_{23}^{(0)}(z) = 2\Delta \sigma_1(z). \quad (133)$$

Ceci conduit à une belle simplification dans le développement de $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$:

$$\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) \stackrel{z \text{ fixé}}{\underset{q \rightarrow 0^+}{\equiv}} -\Delta^2 \sigma_0(z) - \frac{q^2}{z^2} [(z^2 - 2\Delta^2) \Sigma_{11}^{(2)}(z) - z^2 \Sigma_{22}^{(2)}(z)] + O(q^4) \quad (134)$$

en utilisant la seconde égalité de (47) pour éliminer $\Sigma_{13}^{(2)}(z)$ dans l'ordre deux⁵⁵. Comme l'ordre zéro n'est autre que $-(1/2)[\Sigma_{11}^{(0)}(z) - \Sigma_{22}^{(0)}(z)]$, on en déduit en particulier que $\tilde{\chi}_{\uparrow\downarrow}^{\text{dfl}}(\mathbf{q}, z)$ a un départ quadratique $\approx q^2$, si l'on se souvient de l'équation (37) et de la première égalité de (47). Il reste à intégrer (134) sur L_d comme dans (64). Pour cela, on contracte le lacet sur l'axe réel et on utilise les relations $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z = \epsilon + i0^+) - \Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z = \epsilon - i0^+) = 2i\text{Im}[\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z = \epsilon + i0^+)]$, $\epsilon \in \mathbb{R}$ et $\text{Im}[1/(x + i0^+)] = -\pi\delta(x)$, $x \in \mathbb{R}$ (après décomposition de l'intégrande de $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ en éléments simples vis-à-vis de la variable z) pour calculer⁵⁶ l'intégrale sur $\epsilon \in [E_{\text{bord}}(\mathbf{q}), +\infty[$. Dans les intégrales sur le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ restantes, on développe en puissances de $\mathbf{q}$ sous le signe somme puis on intègre terme à terme pour obtenir les intégrales curvilignes des $\Sigma_{ij}^{(n)}(z)$ utiles à l'équation (134) :

$$\begin{aligned} \int_{L_d} \frac{dz}{(-2i\pi)} [\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z) - \Sigma_{22}(\mathbf{q}, z)] \\ = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{2\epsilon_+ \epsilon_-} \\ \stackrel{q \rightarrow 0^+}{=} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{2\epsilon_{\mathbf{k}}^2} + \Delta^2 E_{\mathbf{q}} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{2u^2 E_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}}^2 - \Delta^2) - \epsilon_{\mathbf{k}}^2 \xi_{\mathbf{k}}}{4\epsilon_{\mathbf{k}}^6} + O(q^4) \end{aligned} \quad (135)$$

et

$$\begin{aligned} \int_{L_d} \frac{dz}{(-2i\pi)} \frac{\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z)}{z^2} &= \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_- + \Delta^2}{4\epsilon_+ \epsilon_- (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2} \\ &\stackrel{q \rightarrow 0^+}{=} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{8\epsilon_{\mathbf{k}}^2} - E_{\mathbf{q}} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 \xi_{\mathbf{k}} + 4\Delta^2 E_{\mathbf{k}} u^2}{16\epsilon_{\mathbf{k}}^6} + O(q^4) \end{aligned} \quad (136)$$

où u est le cosinus de l'angle entre $\mathbf{q}$ et $\mathbf{k}$ et l'on rappelle que $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$. Après regroupement dans (134) il vient

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}^{C^0}(\mathbf{q}) \stackrel{q \rightarrow 0^+}{=} - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{4\epsilon_{\mathbf{k}}^2} + E_{\mathbf{q}} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2 \xi_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - 4u^2 E_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}})}{8\epsilon_{\mathbf{k}}^6} + O(q^4) \quad (137)$$

ce qui répond à la question. Nous ne pouvons nous empêcher de remarquer que le résultat est beaucoup plus simple pour la distribution de paires de fermions de spins opposés, où l'on a

$$\delta \tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{C^0}(\mathbf{q}) \stackrel{q \rightarrow 0^+}{=} -E_{\mathbf{q}} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2 u^2 E_{\mathbf{k}}}{4\epsilon_{\mathbf{k}}^4} + O(q^4). \quad (138)$$

A.2. Ce que donne le phonon de Bogolioubov–Anderson

Passons maintenant au développement de la fonction $\Phi(\mathbf{q})$ dans la contribution du phonon de Bogolioubov–Anderson à $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$, en partant de son expression (65). On réutilise les développements (130) des $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ en puissances de q en y ajoutant un développement en puissances de

⁵⁵Une belle retombée mathématique de (134) est que les limites $q \rightarrow 0^+$ et $z \rightarrow 0$ ne commutent pas pour la fonction $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ (ici toujours à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$). De l'équation (134) nous tirons d'abord $\lim_{z \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0^+} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) = -\Delta^2 \sigma_0(0)$. De la définition (51) nous tirons ensuite, pour $\mathbf{q}$ non nul, l'expression $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, 0) = -\Sigma_{23}^2(\mathbf{q}, 0) \Sigma_{11}(\mathbf{q}, 0) / 2 \Sigma_{11}(\mathbf{q}, 0) \Sigma_{22}(\mathbf{q}, 0) = -\Sigma_{23}^2(\mathbf{q}, 0) / 2 \Sigma_{22}(\mathbf{q}, 0)$ sachant que $\Sigma_{11}(\mathbf{q}, 0) > 0$ (voir la note 57), d'où $\lim_{q \rightarrow 0^+} \lim_{z \rightarrow 0} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) = \sigma_1^2(0) / \sigma_0(0)$. On en déduit, de façon équivalente mais plus jolie, que $\lim_{z \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0^+} \tilde{\chi}_{\uparrow\downarrow}^{\text{dfl}}(\mathbf{q}, z) = 0$ tandis que $\lim_{q \rightarrow 0^+} \lim_{z \rightarrow 0} \tilde{\chi}_{\uparrow\downarrow}^{\text{dfl}}(\mathbf{q}, z) = -\rho^{\text{sta}} / 4mc^2$ en anticipant sur le résultat (146).

⁵⁶En pratique, il suffit de savoir que $\text{Im}\{(\epsilon_+ + \epsilon_-) / [(\epsilon + i0^+)^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]\} = (\pi/2)[\delta(\epsilon + \epsilon_+ + \epsilon_-) - \delta(\epsilon - \epsilon_+ - \epsilon_-)]$.

$z = \hbar\omega_{\mathbf{q}} = \hbar c q + O(q^3)$ (c est la vitesse du son), ce que l'on peut faire puisque $z \ll E_{\text{bord}}(\mathbf{q})$ est très éloigné de toute singularité des Σ_{ij} . En se limitant aux ordres utiles ici, on obtient :

$$\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z) \stackrel{z=O(q)}{=} \frac{1}{2} z^2 \sigma_0(0) + q^2 \Sigma_{11}^{(2)}(0) + O(q^4), \quad \Sigma_{22}(\mathbf{q}, z) \stackrel{z=O(q)}{=} -2\Delta^2 \sigma_0(0) + O(q^2), \quad (139)$$

$$\Sigma_{12}(\mathbf{q}, z) \stackrel{z=O(q)}{=} z \sigma_1(0) + O(q^3), \quad \Sigma_{13}(\mathbf{q}, z) \stackrel{z=O(q)}{=} z \Delta \sigma_0(0) + O(q^3), \quad (140)$$

$$\Sigma_{23}(\mathbf{q}, z) \stackrel{z=O(q)}{=} 2\Delta \sigma_1(0) + O(q^2). \quad (141)$$

L'équation (59) sur l'énergie propre du mode de phonon se réduit alors à

$$0 = \left[-|\Delta \sigma_0(0) + i\sigma_1(0)|^2 z^2 - 2\Delta^2 \sigma_0(0) \Sigma_{11}^{(2)}(0) q^2 \right] \Big|_{z=\hbar c q} + O(q^4) \quad (142)$$

ce qui permet d'éliminer le coefficient $\Sigma_{11}^{(2)}(0)$ dans la suite⁵⁷; on en déduit en particulier que

$$\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z = \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \stackrel{q \rightarrow 0^+}{=} \frac{(\hbar c)^2 \sigma_1^2(0)}{2\Delta^2 |\sigma_0(0)|} q^2 + O(q^4) \quad (143)$$

et que son signe s_{11} est égal à 1. On a pu remplacer la quantité $\sigma_0(0)$ par $-|\sigma_0(0)|$ puisqu'elle est négative, comme on le voit bien sur sa définition (131); en revanche, le signe de la quantité $\sigma_1(0)$ donc de $\Sigma_{12}(\mathbf{q}, \hbar\omega_{\mathbf{q}})$ est indéterminé, mais c'est aussi celui de $\Sigma_{23}(\mathbf{q}, \hbar\omega_{\mathbf{q}})$ donc il se factorise et disparaît dans le carré au numérateur de $\Phi(\mathbf{q})$ dans (65). Le dénominateur de $\Phi(\mathbf{q})$ dans (65) s'obtient par simple dérivation par rapport à z de l'expression entre crochets dans (142). On aboutit en définitive à l'équivalent de $\Phi(\mathbf{q})$ cherché :

$$\Phi(\mathbf{q}) \stackrel{q \rightarrow 0^+}{=} \frac{\hbar c q}{|\sigma_0(0)|} |\Delta \sigma_0(0) + i\sigma_1(0)|^2 + O(q^3) \quad (144)$$

avec, rappelons-le pour la commodité de la lecture,

$$\sigma_0(0) = - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{4\epsilon_{\mathbf{k}}^3}, \quad \sigma_1(0) = - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{4\epsilon_{\mathbf{k}}^3}. \quad (145)$$

Pour obtenir la forme (79) beaucoup plus belle de $\Phi'(0)$ utilisée dans la section 3.1, il suffit de prendre la dérivée par rapport au potentiel chimique de l'équation (12) sur le paramètre d'ordre et de l'équation (17) sur la densité à longueur de diffusion a_{dD} fixée, avec ici $f_{\mathbf{k}} \equiv 0$ rappelons-le, puis de se souvenir de la relation hydrodynamique (28) satisfaite par la théorie BCS statique :

$$\Delta \frac{d}{d\mu} \Delta = \frac{\sigma_1(0)}{\sigma_0(0)}, \quad \frac{\rho^{\text{sta}}}{mc^2} = \frac{d}{d\mu} \rho^{\text{sta}} = -4 \left[\Delta^2 \sigma_0(0) + \Delta \left(\frac{d}{d\mu} \Delta \right) \sigma_1(0) \right] = \frac{4}{|\sigma_0(0)|} |\Delta \sigma_0(0) + i\sigma_1(0)|^2. \quad (146)$$

L'équation (144) se simplifie alors comme annoncé :

$$\Phi(\mathbf{q}) \stackrel{q \rightarrow 0^+}{=} \frac{\hbar \rho^{\text{sta}}}{4mc} q + O(q^3). \quad (147)$$

⁵⁷L'équation (142) sur z n'a de solution réelle que si $\Sigma_{11}^{(2)}(0)$ est positif. Pour le vérifier, toujours à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, on montre que $\Sigma_{11}(\mathbf{q}, 0) = \int_{\mathbb{R}^d} [d^d k / (2\pi)^d] (\xi_+ - \xi_-)^2 / 4\epsilon_+ \epsilon_- (\epsilon_+ + \epsilon_-)$ en utilisant la version symétrisée du contre-terme (voir la note 59) puis en mettant l'intégrande au même dénominateur. Or, on a simplement $\xi_+ - \xi_- = \hbar^2 k q \cos \theta / m$ où θ est l'angle entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{q}$, si bien que $\Sigma_{11}^{(2)}(0) = \int_{\mathbb{R}^d} [d^d k / (2\pi)^d] (\hbar^2 k \cos \theta / m)^2 / 8\epsilon_{\mathbf{k}}^3 > 0$. La même méthode donne à z non nul

$$\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^d} [d^d k / (2\pi)^d] (\epsilon_+ + \epsilon_-) [(\xi_+ - \xi_-)^2 - z^2] / 4\epsilon_+ \epsilon_- [(\epsilon_+ + \epsilon_-)^2 - z^2],$$

d'où [23, identité (19)].

A.3. Applications : relations sommatoires

En première application, nous vérifions que, dans notre théorie BCS dépendant du temps linéarisée, le phonon de Bogolioubov–Anderson sature à l’ordre dominant en q la relation sommatoire bien connue sur la susceptibilité densité-densité [75]

$$\mathcal{R}(\mathbf{q}) \equiv \int_{\mathbb{R}} \frac{d\epsilon}{(-\pi)} \epsilon \operatorname{Im} [\tilde{\chi}_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)] = \rho \frac{\hbar^2 q^2}{m} \quad (148)$$

(la relation ne serait catastrophiquement pas vérifiée par la théorie BCS statique à faible q [11]). De la note 12 et des expressions (37) et (38) puis de l’équation (47), nous déduisons que $\tilde{\chi}_{\rho\rho}^{\text{dnl}}(\mathbf{q}, z) = 2\Sigma_{33}(\mathbf{q}, z) + 4\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) = 2(\Sigma_{11} - \Sigma_{22} + \Sigma_{44})(\mathbf{q}, z) + 4\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$. La fonction $z \mapsto \tilde{\chi}_{\rho\rho}^{\text{dnl}}(\mathbf{q}, z)$ admet donc un pôle en $z = \hbar\omega_{\mathbf{q}}$ de résidu $2\Phi(\mathbf{q})$ et un pôle en $z = -\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ de résidu opposé (c’est une fonction paire), si l’on revient à la définition de $\Phi(\mathbf{q})$ dans le texte précédant l’équation (65). Comme $\operatorname{Im}[1/(\epsilon \mp \hbar\omega_{\mathbf{q}} + i0^+)] = -\pi\delta(\epsilon \mp \hbar\omega_{\mathbf{q}})$, la contribution du phonon à la relation sommaire s’écrit

$$\mathcal{R}^{\phi}(\mathbf{q}) = 4\Phi(\mathbf{q})\hbar\omega_{\mathbf{q}} \underset{q \rightarrow 0^+}{=} \rho^{\text{sta}} \frac{\hbar^2 q^2}{m} + O(q^4). \quad (149)$$

Il reste donc à montrer que la contribution du continuum est un $O(q^4)$. À l’aide du développement (134) et de l’expression (42) de $\Sigma_{44}(\mathbf{q}, z)$, nous trouvons que $\Sigma_{44}^{(0)}(z) \equiv 0$ et que

$$\frac{1}{4}\tilde{\chi}_{\rho\rho}^{\text{dnl}}(\mathbf{q}, z) \underset{z \rightarrow 0^+}{\stackrel{\text{fixé}}{=}} \frac{2q^2\Delta^2}{z^2}\Sigma_{11}^{(2)}(z) + \frac{q^2}{2}[-\Sigma_{11}^{(2)}(z) + \Sigma_{22}^{(2)}(z) + \Sigma_{44}^{(2)}(z)] + O(q^4). \quad (150)$$

En intégrant sur ϵ comme dans les équations (135) et (136), voir la note 56, et en remarquant que la partie à $\epsilon < 0$ vient doubler celle à $\epsilon > 0$, nous aboutissons à

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R} \setminus [-E_{\text{bord}}(\mathbf{q}), E_{\text{bord}}(\mathbf{q})]} \frac{d\epsilon}{(-\pi)} \epsilon \operatorname{Im} [\tilde{\chi}_{\rho\rho}^{\text{dnl}}(\mathbf{q}, \epsilon + i0^+)] &= \int_{q \rightarrow 0^+} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{4\Delta^2(\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_- + \Delta^2)}{(\epsilon_+ + \epsilon_-)\epsilon_+ \epsilon_-} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(\epsilon_+ + \epsilon_-)}{\epsilon_+ \epsilon_-} [-(\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_- + \Delta^2) + (\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_+ - \Delta^2) + (\epsilon_+ \epsilon_- - \xi_+ \xi_+ - \Delta^2)] \right\} + O(q^4). \end{aligned} \quad (151)$$

Ceci est nul à l’ordre q^2 , même avant intégration sur l’angle et sur le module de $\mathbf{k}$, comme le montre un développement limité de l’intégrande. On a donc bien

$$\mathcal{R}^{C^0}(\mathbf{q}) \underset{q \rightarrow 0^+}{=} O(q^4). \quad (152)$$

En seconde application, nous soumettons les différentes théories BCS au test des relations sommatoires exactes suivantes sur les écarts aux valeurs asymptotiques,

$$\int_{\mathbb{R}^d} d^d r \delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\rho_{\sigma} \delta_{\sigma\sigma'} + k_B T \partial_{\mu_{\sigma'}} \rho_{\sigma}(\mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}) \stackrel{\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = \mu}{=} -\frac{1}{2} \rho \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{1}{4} k_B T \partial_{\mu} \rho \quad (153)$$

où $\mathbf{r}'$ prend une valeur fixée arbitraire, par exemple $\mathbf{r}' = \mathbf{0}$, et l’on a tenu compte du fait, dans la seconde égalité, que $\rho(\mu) = 2\rho_{\sigma}(\mu, \mu)$ dans le cas non polarisé considéré dans cet article⁵⁸. La

⁵⁸Avec les relations d’anticommuation fermioniques sur les opérateurs de champ, on se ramène à montrer que $\int_{\mathbb{R}^d} d^d r C_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = k_B T \partial_{\mu_{\sigma'}} \rho_{\sigma}$ où $C_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\rho}_{\sigma}(\mathbf{r}) \hat{\rho}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle - \langle \hat{\rho}_{\sigma}(\mathbf{r}) \rangle \langle \hat{\rho}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle$ et $\hat{\rho}_{\sigma}(\mathbf{r}) \equiv \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$. À cette fin, on pourrait être tenté de se placer dans l’habituelle boîte de quantification $[0, L]^d$ avec des conditions aux limites périodiques [73]. En intégrant la fonction de corrélation sur $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ dans le volume $\mathcal{V}$ de la boîte, on obtiendrait alors $I_{\sigma\sigma'}(\mathcal{V}) \equiv \mathcal{V}^{-1} \int_{\mathcal{V}} d^d r' \int_{\mathcal{V}} d^d r C_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{V}^{-1} \operatorname{Cov}(\hat{N}_{\sigma}, \hat{N}_{\sigma'})$ où Cov est la covariance et $\hat{N}_{\sigma}$ l’opérateur nombre total de fermions de spin σ . Par homogénéité spatiale, on aurait aussi $I_{\sigma\sigma'}(\mathcal{V}) = \int_{\mathcal{V}} d^d r C_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ pour $\mathbf{r}'$ fixé quelconque. À la limite thermodynamique dans l’ensemble grand-canonique, on aboutirait au résultat escompté puisque $\operatorname{Cov}(\hat{N}_{\sigma}, \hat{N}_{\sigma'}) = -k_B T \partial_{\mu_{\sigma}} \partial_{\mu_{\sigma'}} \Omega$ et $\langle \hat{N}_{\sigma} \rangle = -\partial_{\mu_{\sigma}} \Omega$ avec $\Omega = -k_B T \ln \Xi$ le grand potentiel et $\Xi = \operatorname{Tr} \exp[-\beta(\hat{H} - \mu_{\uparrow} \hat{N}_{\uparrow} - \mu_{\downarrow} \hat{N}_{\downarrow})]$ la fonction de partition grand-canonique. Mais dans l’ensemble canonique, on aurait $I_{\sigma\sigma'}(\mathcal{V}) \equiv 0$ car les N_{σ} sont fixés. La démonstration n’est donc visiblement pas valable. La raison en est donnée dans [5, note 64 de la section 8.7.2.2] : afin d’obtenir le résultat universel (153), l’intégrale sur $\mathbf{r}$ doit être effectuée *après* prise de la limite thermodynamique donc pour un système infini, ce que nous indiquons désormais par un symbole ∞ . En effet, $C_{\sigma\sigma'}^{\infty}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \lim_{\text{thermo.}} C_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$

relation (6) de la section 1 n'est qu'un cas particulier, écrit pour $\sigma \neq \sigma'$ et à température nulle. Il est commode ici de reformuler (153) en une contrainte sur la limite des transformées de Fourier à vecteur d'onde nul, sachant que

$$\lim_{q \rightarrow 0^+} \delta \tilde{g}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}) = \int_{\mathbb{R}^d} d^d r \delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (156)$$

Nous nous plaçons comme précédemment à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$, c'est-à-dire formellement à une température nulle pour la théorie BCS statique. Alors, au vu des expressions (56) et (57) des transformées de Fourier, cette théorie viole manifestement la relation (153) dans toutes les configurations de spin possibles :

$$\lim_{q \rightarrow 0^+} \delta \tilde{g}_{\uparrow\downarrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}) = + \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{4\epsilon_{\mathbf{k}}^2} > 0, \quad (157)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0^+} \delta \tilde{g}_{\uparrow\uparrow}^{\text{sta}}(\mathbf{q}) = - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}}\right)^2 > -\frac{1}{2} \rho^{\text{sta}} = - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}}\right), \quad (158)$$

l'inégalité dans (158) résultant de l'identité

$$\Delta^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}})^2 = 2\epsilon_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}) \quad (159)$$

évidente compte tenu de (10). Cette insuffisance de BCS statique était soulignée déjà sur $\delta g_{\rho\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans la référence [76]. Qu'en est-il pour BCS dépendant du temps linéarisé? Pour le voir, on calcule la limite de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ à vecteur d'onde nul, par simple regroupement des résultats (138) et (147) dans l'expression (64) :

$$\lim_{q \rightarrow 0^+} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{4mc^2} \rho^{\text{sta}} - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{4\epsilon_{\mathbf{k}}^2} \quad (160)$$

à $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ fixés ne dépend pas de l'ensemble statistique choisi. Mais on peut sauver le raisonnement simple précédent en l'appliquant à un sous-volume fini B d'un gaz infini, par exemple une boule de rayon R . On a alors

$$I_{\sigma\sigma'}(B) \equiv \frac{1}{\mathcal{V}_B} \int_B d^d r' \int_B d^d r C_{\sigma\sigma'}^\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{\mathcal{V}_B} \text{Cov}_\infty(\hat{N}_\sigma^B, \hat{N}_{\sigma'}^B) \quad (154)$$

où $\hat{N}_\sigma^B$ est cette fois l'opérateur nombre de fermions de spin σ dans le sous-volume B de mesure $\mathcal{V}_B$. Deux remarques dans la limite $R \rightarrow +\infty$ nous séparent du résultat.

- (i) À position $\mathbf{r}'$ fixée, l'intégrale $\int d^d r C_{\sigma\sigma'}^\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ converge absolument sur une distance finie ℓ de $\mathbf{r}'$, voir les comportements asymptotiques de $\delta g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans la section 3.1; au deuxième membre de (154), on peut donc remplacer $\int_B d^d r$ par $\int_{\mathbb{R}^d} d^d r$, auquel cas l'intégrale sur $\mathbf{r}$ ne dépend plus de $\mathbf{r}'$, sauf si $\mathbf{r}'$ est à une distance $\lesssim \ell$ du bord; on en déduit que $I_{\sigma\sigma'}(B) = \int_{\mathbb{R}^d} d^d r C_{\sigma\sigma'}^\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + o(1)$, et les effets de bord liés à la coupure nette définissant B deviennent négligeables (au pire, c'est-à-dire à $T = 0$, le $o(1)$ pour une boule de rayon R est $\sim 3\Phi'(0) \ln(R/\xi)/2\pi R$ à 3D et $\sim \Phi'(0) \ln(R/\xi)/\pi R$ à 2D où $\xi = \hbar/mc$, voir [5, section 8.7.2.2] basée sur [17, expressions (46) et (47)]).
- (ii) De plus, le sous-volume B présente à un $o(R^{d/2})$ près des fluctuations de son nombre de particules qui sont *grand-canoniques* puisque, par construction, le sous-système dans B peut échanger de l'énergie et des particules avec le reste du gaz, qui est infini et à l'équilibre donc qui joue parfaitement le rôle d'un réservoir grand-canonique. Ceci explique pourquoi la bonne covariance à prendre dans le raisonnement simple est celle de l'ensemble grand-canonique [76]. Le troisième membre de (154) se réduit ainsi à $k_B T \partial_{\mu_{\sigma'}} \rho_\sigma$ à un $o(1)$ près, et l'on retrouve (153) lorsque $R \rightarrow +\infty$. À $T = 0$, ceci permet de réécrire les estimations des $o(1)$ dans la boule de rayon R de façon plus parlante,

$$\frac{1}{\mathcal{V}_B} \text{Cov}_\infty(\hat{N}_\sigma^B, \hat{N}_{\sigma'}^B) \Big|_{T=0} \underset{R \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{d=3}{8\pi mcR/\hbar} \frac{3\rho \ln(mcR/\hbar)}{8\pi mcR/\hbar}, \quad \frac{1}{\mathcal{V}_B} \text{Cov}_\infty(\hat{N}_\sigma^B, \hat{N}_{\sigma'}^B) \Big|_{T=0} \underset{R \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{d=2}{4\pi mcR/\hbar} \frac{\rho \ln(mcR/\hbar)}{4\pi mcR/\hbar}, \quad (155)$$

après remplacement de $\Phi'(0)$ par sa valeur exacte $\hbar\rho/4mc$, voir la section 3.1.3.

avec

$$\int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta^2}{4\epsilon_{\mathbf{k}}^2} = \begin{cases} \frac{m\Delta}{8\pi\hbar^2} \left(\frac{\pi}{2} + \arctan \frac{\mu}{\Delta} \right) & \text{si } d = 2, \\ \frac{m^{3/2}\Delta}{8\pi\hbar^3} \left(\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta^2} \right)^{1/2} & \text{si } d = 3. \end{cases} \quad (161)$$

On remarque en passant que la limite est négative à suffisamment basse température. En ajoutant son expression intégrale (160) aux limites (157) et (158) de la théorie statique, on obtient

$$\lim_{q \rightarrow 0^+} \delta \tilde{g}_{\sigma\sigma'}^{\text{dnl}}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{2} \rho^{\text{sta}} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{1}{4} k_B T \partial_\mu \rho^{\text{sta}} \quad (162)$$

en se souvenant de (159) et de l'expression hydrodynamique (28) de la vitesse du son, conduisant ici à $\rho^{\text{sta}}/mc^2 = \partial_\mu \rho^{\text{sta}}$. Il y a donc accord parfait avec la relation sommatoire (153) pour l'équation d'état BCS statique.

Annexe B. Développement à grand q de $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$

Comme il est expliqué dans la section 3.3.1, nous sommes à l'ordre zéro en $\exp(-\beta E_{\text{gap}})$ (tous les nombres d'occupation de Fermi–Dirac $f_{\mathbf{k}}, f_{\pm}$ sont mis à zéro) et nous devons développer la partie collective $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ (51) des susceptibilités densité-densité dans la limite $q \rightarrow +\infty$ en puissances de q^{-1} à énergie complexe réduite $Z = z/E_{\mathbf{q}}$ fixée (ici $E_{\mathbf{q}} = \hbar^2 q^2/2m$ comme dans l'équation (11) et l'on prend $Z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ pour éviter les singularités — pôles ou lignes de coupure — sur l'axe réel), en allant à un ordre assez élevé pour que la contribution correspondante à $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ — obtenue par intégration curviligne sur le chemin C_d comme dans (111) — soit non nulle.

Nous utilisons pour cela la méthode de développement multiéchelle⁵⁹ de [5, section 4.3.5.4], déjà esquissée dans notre section 3.3 (voir les notes 45, 47, 50 et 53), (i) en limitant l'intégration sur $\mathbf{k}$ au demi-espace $\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} > 0$ au prix d'un facteur deux global, (ii) en développant l'intégrande en puissances de q^{-1} à $\mathbf{k}_- \equiv \mathbf{k} - \mathbf{q}/2$ fixé dans la boule $k_- < \eta q$, $\eta \ll 1$, (iii) en développant l'intégrande sur le complémentaire de la boule en puissances de q^{-1} à $\mathbf{K}_- = \mathbf{k}_-/q$ fixé, (iv) en redéveloppant l'ensemble en puissances de q^{-1} , en particulier en écrivant $\int_0^{\eta q} dq f(q) = \int_0^{+\infty} dq f(q) - \int_{\eta q}^{+\infty} dq f(q)$ et en remplaçant $f(q)$ par son développement asymptotique dans la troisième intégrale, et enfin (v) en prenant la limite $\eta \rightarrow 0^+$ dans les coefficients de q^{-n} .

B.1. Deux astuces simplificatrices et une table récapitulative

Les calculs à venir sont grandement simplifiés par deux astuces.

Premièrement, on peut transformer avantageusement l'expression (51) de $\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$ en introduisant des demi-sommes et des demi-différences comme suit :

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{q}, z) &\equiv \frac{1}{2} [\Sigma_{23}(\mathbf{q}, z) + \Sigma_{13}(\mathbf{q}, z)], \\ D_{12}(\mathbf{q}, z) &\equiv \frac{1}{2} [\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z) - \Sigma_{22}(\mathbf{q}, z)], \\ S_{12}(\mathbf{q}, z) &\equiv \frac{1}{2} [\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z) + \Sigma_{22}(\mathbf{q}, z)] + \Sigma_{12}(\mathbf{q}, z). \end{aligned}$$

⁵⁹Pour mettre en œuvre cette méthode, nous remplaçons au besoin le contre-termes $1/2\epsilon_{\mathbf{k}}$ par $1/4\epsilon_+ + 1/4\epsilon_-$ dans la définition (39) et (40) de $\Sigma_{11}(\mathbf{q}, z)$ et $\Sigma_{22}(\mathbf{q}, z)$, afin que les seuls points singuliers dans la limite $q \rightarrow +\infty$ à $\mathbf{k}/q$ fixé soient les $\mathbf{k} = \pm \mathbf{q}/2$ (et pas $\mathbf{k} = \mathbf{0}$). Nous y sommes autorisé par l'identité $\int_{\mathbb{R}^d} [d^d k/(2\pi)^d] (2\epsilon_{\mathbf{k}}^{-1} - \epsilon_+^{-1} - \epsilon_-^{-1}) = 0$ que nous démontrons en introduisant $\Phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbb{R}^d} [d^d k/(2\pi)^d] (2\epsilon_{\mathbf{k}}^{-1} - \epsilon_+^{-1} - \epsilon_-^{-1}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 2[1 - \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/2)]\phi(\mathbf{r})$ avec $\phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbb{R}^d} [d^d k/(2\pi)^d] \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})/\epsilon_{\mathbf{k}}$, puis en remarquant que $\Phi(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow 0^+$ puisque $\phi(\mathbf{r}) = O(\ln r)$ à 2D et $\phi(\mathbf{r}) = O(1/r)$ à 3D.

On a alors, compte tenu de la parité paire ou impaire des fonctions $\Sigma_{ij}(\mathbf{q}, z)$ en la variable z :

$$\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) = - \frac{\alpha^2(\mathbf{q}, z)S_{12}(\mathbf{q}, -z) + \alpha^2(\mathbf{q}, -z)S_{12}(\mathbf{q}, z) + 2\alpha(\mathbf{q}, z)\alpha(\mathbf{q}, -z)D_{12}(\mathbf{q}, z)}{S_{12}(\mathbf{q}, z)S_{12}(\mathbf{q}, -z) - D_{12}^2(\mathbf{q}, z)}. \quad (163)$$

Or, il se trouve qu'à l'ordre en q^{-1} où nous irons, le carré de D_{12} au dénominateur restera négligeable et nous pourrons utiliser la forme simplifiée

$$\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z) \simeq - \frac{\alpha^2(\mathbf{q}, z)}{S_{12}(\mathbf{q}, z)} - \frac{\alpha^2(\mathbf{q}, -z)}{S_{12}(\mathbf{q}, -z)} - \frac{2\alpha(\mathbf{q}, z)\alpha(\mathbf{q}, -z)D_{12}(\mathbf{q}, z)}{S_{12}(\mathbf{q}, z)S_{12}(\mathbf{q}, -z)}. \quad (164)$$

Donnons en effet l'équivalent des lois de puissance (110) pour les nouvelles combinaisons introduites, obtenues par le même argument de comptage de puissances :

$$S_{12}(\mathbf{q}, z) \approx q^{d-2}, \quad \alpha(\mathbf{q}, z) \approx q^{d-4}, \quad D_{12}(\mathbf{q}, z) \approx q^{d-6}. \quad (165)$$

Ainsi D_{12}^2 au dénominateur est une correction d'ordre relatif $q^{2d-12}/q^{2d-4} = q^{-8}$ alors que nous irons seulement à l'ordre relatif q^{-2} à 2D, voir l'équation (112), et à l'ordre relatif q^{-4} à 3D, voir l'équation (113). On trouve de même que le troisième terme dans (164), d'ordre relatif q^{-4} par rapport au premier, pourra être négligé à 2D mais pas à 3D. Notons pour terminer ce point que le premier et le deuxième terme de (164) ont exactement la même intégrale curviligne⁶⁰ sur le lacet C_d :

$$\int_{C_d} dz \left[- \frac{\alpha^2(\mathbf{q}, -z)}{S_{12}(\mathbf{q}, -z)} \right] = \int_{C_d} dz \left[- \frac{\alpha^2(\mathbf{q}, z)}{S_{12}(\mathbf{q}, z)} \right] \quad (167)$$

si bien que la contribution du deuxième terme à $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ double exactement celle du premier.

Deuxièmement, le développement en puissances de q^{-1} est formidablement allégé par la procédure suivante :

- (i) on suppose temporairement que le potentiel chimique μ est strictement négatif et l'on pose $\mu = -\nu E_{\mathbf{q}}$, $\nu > 0$ (comme μ est fixé, ν tend vers zéro comme $1/q^2$);
- (ii) on construit des auxiliaires de calcul $f^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ en remplaçant $\epsilon_{\pm}$ par $\xi_{\pm}$ dans les expressions intégrales de chaque fonction $f(\mathbf{q}, z)$ (ici en pratique $f = \alpha, S_{12}, D_{12}$);
- (iii) il se trouve qu'on sait calculer analytiquement les $f^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$, ce qui permet de les développer en puissances de ν donc de q^{-2} ;
- (iv) il reste à développer les restes $\delta f(\mathbf{q}, z) \equiv f(\mathbf{q}, z) - f^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ par la méthode multiéchelle mentionnée plus haut;
- (v) enfin, on regroupe les résultats et on les étend formellement au cas $\mu > 0$.

⁶⁰Considérons une fonction générale $F(z)$ de la variable complexe analytique en dehors des intervalles réels $[a, +\infty[$ et $]-\infty, -a]$ avec $a > 0$, et montrons qu'on a en toute généralité

$$\int_{C_d} dz F(-z) = \int_{C_d} dz F(z). \quad (166)$$

Ici, comme sur la figure 2(b), le lacet orienté C_d entoure les singularités de $F(z)$ sur le demi-axe réel positif, et le lacet orienté C_g à venir, qui s'en déduit par l'action de $z \rightarrow -z$, entoure celles sur le demi-axe réel négatif. Nous raisonnons en deux temps.

- (i) Le changement de variable $z = -z'$ donne $\int_{C_d} dz F(-z) = \int_{C_g} (-dz') F(z')$.
- (ii) Refermons le double lacet $C_g \cup C_d$ par un demi-cercle à l'infini DC_h dans le demi-plan supérieur et un demi-cercle à l'infini DC_b dans le demi-plan inférieur; le contour obtenu $C_d \cup DC_h \cup C_g \cup DC_b$ n'entoure aucune singularité de l'intégrande donc, d'après le théorème de Cauchy, l'intégrale curviligne correspondante est nulle, $\int_{C_d} dz F(z) + \int_{DC_h} dz F(z) + \int_{C_g} dz F(z) + \int_{DC_b} dz F(z) = 0$. Si les contributions des demi-cercles sont nulles (par exemple parce que $F(z)$ décroît à l'infini comme $1/|z|^\alpha$, $\alpha > 1$), ceci impose $\int_{C_d} dz F(z) + \int_{C_g} dz F(z) = 0$.

Il reste à associer (i) et (ii) pour aboutir à la propriété (166) annoncée (z' est une variable muette dans le point (i)).

Donnons les expressions intégrales des fonctions utiles et de leurs auxiliaires⁶¹ :

$$\alpha(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta(\epsilon_+ + \epsilon_-)(z + \xi_+ + \xi_-)}{4\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]}, \quad (168)$$

$$\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\Delta(\xi_+ + \xi_-)}{4\xi_+ \xi_- [z - (\xi_+ + \xi_-)]}, \quad (169)$$

$$S_{12}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ \frac{(\epsilon_+ + \epsilon_-)(\epsilon_+ \epsilon_- + \xi_+ \xi_-) + z(\epsilon_+ \xi_- + \epsilon_- \xi_+)}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]} + \frac{1}{4\epsilon_+} + \frac{1}{4\epsilon_-} \right\}, \quad (170)$$

$$S_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left[\frac{1}{z - (\xi_+ + \xi_-)} + \frac{1}{4\xi_+} + \frac{1}{4\xi_-} \right], \quad (171)$$

$$D_{12}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{(\epsilon_+ + \epsilon_-)\Delta^2}{2\epsilon_+ \epsilon_- [z^2 - (\epsilon_+ + \epsilon_-)^2]}, \quad (172)$$

$$D_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{(\xi_+ + \xi_-)\Delta^2}{2\xi_+ \xi_- [z^2 - (\xi_+ + \xi_-)^2]}. \quad (173)$$

Comme on le voit, les fonctions auxiliaires $\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ et $S_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ admettent comme seule singularité dans le plan complexe la ligne de coupure $z \in \{\xi_+ + \xi_- \mid \mathbf{k} \in \mathbb{R}^d\} = [E_{\mathbf{q}}/2 - 2\mu, +\infty[$ c'est-à-dire $Z \in [1/2 + 2\nu, +\infty[$; en particulier, elles n'ont aucune singularité sur l'axe réel négatif, et leurs contributions aux deux premiers termes de (164) tombent sous le coup du raisonnement illustré par la figure 4 (leur intégrale curviligne sur C_d est nulle); il en va bien entendu autrement pour les restes $\delta\alpha(\mathbf{q}, z)$ et $\delta S_{12}(\mathbf{q}, z)$, si leur développement en puissances de q^{-1} est poussé assez loin. Nous verrons que ce sont des termes croisés (ou d'interférence) entre $\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ et $\delta\alpha(\mathbf{q}, z)$ qui donneront la contribution dominante non nulle à l'intégrale de contour des deux premiers termes de (164). Le problème ne se pose pas dans le troisième terme de (164) : celui-ci présente automatiquement des singularités à la fois sur $\mathbb{R}^+$ et sur $\mathbb{R}^-$ parce qu'il contient un facteur $\alpha(\mathbf{q}, z)\alpha(\mathbf{q}, -z)$, mais aussi un facteur $D_{12}(\mathbf{q}, z)$, dont la fonction auxiliaire admet la réunion d'intervalles $Z \in]-\infty, -1/2 - 2\nu] \cup [1/2 + 2\nu, +\infty[$ comme lignes de coupure. Enfin, on peut remarquer que les fonctions introduites ne sont pas indépendantes, au sens où

$$D_{12}(\mathbf{q}, z) = \frac{\Delta}{z} [\alpha(\mathbf{q}, z) - \alpha(\mathbf{q}, -z)] \quad \text{et donc} \quad D_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) = \frac{\Delta}{z} [\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) - \alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, -z)] \quad (174)$$

ce qui n'est qu'une reformulation de la seconde relation dans (47).

TABLE 1. Ordres dominants et ordres a priori requis pour les différentes fonctions.

	dom. $d = 2$	req. $d = 2$	dom. $d = 3$	req. $d = 3$
$\alpha(\mathbf{q}, z)$	q^{-2}	q^{-4}	q^{-1}	q^{-5}
$S_{12}(\mathbf{q}, z)$	q^{+0}	q^{-2}	q^{+1}	q^{-3}
$D_{12}(\mathbf{q}, z)$	q^{-4}	–	q^{-3}	q^{-3}
$\tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$	q^{-4}	q^{-6}	q^{-3}	q^{-7}
1 ^{er} ou 2 ^e terme dans (164)	q^{-4}	q^{-6}	q^{-3}	q^{-7}
3 ^e terme dans (164)	q^{-8}	–	q^{-7}	q^{-7}
$\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$	q^{-4}	q^{-4}	q^{-4}	q^{-5}

⁶¹La symétrisation du contre-terme dans l'équation (171) est utile pour le développement multiéchelle de $\delta S_{12}(\mathbf{q}, z)$ en puissances de q^{-1} . Elle ne l'est pas pour le calcul analytique de $S_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ (elle ne fait que compliquer l'intégration angulaire sans changer le résultat final).

Pour faciliter la suite, nous résumons dans la table 1 les ordres dominants et les ordres a priori requis pour les différentes fonctions (faut-il le rappeler, on a $z = ZE_{\mathbf{q}}$ et $q \rightarrow +\infty$ avec Z fixé, et l'on se souvient des équations (112) et (113) et de la première égalité donnant $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ sous forme d'une intégrale de contour dans (111)).

B.2. Cas bidimensionnel

En dimension $d = 2$, nous obtenons les expressions explicites des fonctions auxiliaires après intégration angulaire, puis radiale au moyen du changement de variable⁶² $x = k^2/q^2$:

$$\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) = \frac{m\Delta}{4\pi\hbar^2 E_{\mathbf{q}}} \frac{\ln[4\nu + 1 - Z - \sqrt{4\nu + (Z-1)^2}] - \ln[4\nu + 1 - Z + \sqrt{4\nu + (Z-1)^2}]}{\sqrt{4\nu + (Z-1)^2}}, \quad (175)$$

$$S_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \left[\ln\left(2\nu + \frac{1}{2} - Z\right) - \ln(2\nu) \right]. \quad (176)$$

Nous obtenons ensuite aux ordres requis les développements⁶³ des restes $\delta f(\mathbf{q}, z)$:

$$\begin{aligned} \delta\alpha(\mathbf{q}, z) &\stackrel{Z \text{ fixé}}{q \rightarrow +\infty} \frac{m\Delta}{4\pi\hbar^2 E_{\mathbf{q}}} \frac{2\ln(q/q_{\text{dim}}) + \ln \nu}{Z-1} + \boxed{\frac{\rho^{\text{sta}}\Delta}{(2E_{\mathbf{q}})^2} \frac{1}{Z+1}} + \frac{\Delta}{(2E_{\mathbf{q}})^2} \frac{1}{(Z-1)^3} \\ &\quad \times \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (\epsilon_{\mathbf{k}}^{-1} - \xi_{\mathbf{k}}^{-1}) [2E_{\mathbf{k}} + (Z^2 - 1)\xi_{\mathbf{k}}] + O(q^{-6} \ln q), \end{aligned} \quad (177)$$

$$\delta S_{12}(\mathbf{q}, z) \stackrel{Z \text{ fixé}}{q \rightarrow +\infty} \frac{m}{4\pi\hbar^2} \ln(\nu q^2/q_{\text{dim}}^2) - \frac{1}{E_{\mathbf{q}}} \frac{\rho^{\text{sta}}}{Z-1} + O(q^{-4}). \quad (178)$$

La contribution la plus intéressante dans tous ces résultats est celle encadrée dans $\delta\alpha(\mathbf{q}, z)$: c'est la seule à présenter une singularité sur le demi-axe réel négatif (un pôle en $Z = -1$). Nous la notons $\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)$ dans la suite,

$$\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) = \frac{\rho^{\text{sta}}\Delta}{(2E_{\mathbf{q}})^2} \frac{1}{Z+1} = \frac{\rho^{\text{sta}}\Delta}{4E_{\mathbf{q}}(z + E_{\mathbf{q}})} \quad (179)$$

car c'est l'ordre dominant en q^{-1} de la partie $\alpha_{\text{sing}}(\mathbf{q}, z)$ de $\alpha(\mathbf{q}, z)$ singulière⁶⁴ sur $\mathbb{R}^-$. Tout le reste donnera une contribution nulle après intégration sur le contour C_d , voir la discussion autour de la figure 4. Nous pouvons donc, dans le premier terme de (164), faire la substitution

$$-\frac{\alpha^2(\mathbf{q}, z)}{S_{12}(\mathbf{q}, z)} \longrightarrow -\frac{2\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)}{S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)} \quad (180)$$

avec les comportements dominants des fonctions⁶⁵ $\alpha(\mathbf{q}, z)$ et $S_{12}(\mathbf{q}, z)$:

$$\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) = \frac{m\Delta}{4\pi\hbar^2 E_{\mathbf{q}}} \frac{1}{Z-1} [2\ln(q/q_{\text{dim}}) + 2\ln(1-Z) - \ln(1-2Z)], \quad (181)$$

⁶²On pose de plus $x = \frac{1}{4} - \nu + \nu^{1/2}(t - t^{-1})/2$ avec $t \in [2\nu^{1/2}, +\infty[$ dans l'intégrale donnant $\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ afin de transformer en fraction rationnelle la partie difficile $[(x + \nu + 1/4)^2 - x]^{1/2} = \nu^{1/2}(1 + t^2)/2t$. La racine carrée au dénominateur de (175) n'introduit malgré les apparences aucune ligne de coupure car le numérateur est — comme le dénominateur — une fonction impaire de cette racine carrée (or, une racine carrée se transforme en son opposé lorsqu'elle traverse sa ligne de coupure). Les logarithmes dans (175) admettent bien $Z \in [\frac{1}{2} + 2\nu, +\infty[$ comme ligne de coupure.

⁶³Pour expliciter certaines intégrales, nous avons utilisé l'équation d'état (17) et l'équation sur le paramètre d'ordre (12) de la théorie BCS statique à température nulle. Par exemple,

$$\int_{\mathbb{R}^2} [d^2k/(2\pi)^2] (\epsilon_{\mathbf{k}}^{-1} - \xi_{\mathbf{k}}^{-1}) = (m/2\pi\hbar^2) \ln(\nu q^2/q_{\text{dim}}^2).$$

⁶⁴On la retrouve aisément en transposant la note 69 au cas bidimensionnel.

⁶⁵On les obtient en développant (175) et (176) à l'ordre ν^0 et en regroupant avec (177) et (178); on vérifie que les logarithmes $\ln \nu$ se compensent exactement dans le regroupement.

$$S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \left[2\ln\left(\frac{q}{2q_{\text{dim}}}\right) + \ln(1-2Z) \right]. \quad (182)$$

Après la substitution (180), l'intégrale curviligne (111) du premier terme de (164) se calcule très bien en refermant le lacet C_d par un grand cercle à l'infini, comme sur la figure 4; la seule singularité entourée est alors le pôle de $\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)$ en $Z = -1$. L'intégrale curviligne sur C_d du second terme (soumis à la même substitution) se déduit directement du théorème des résidus sans déformer le lacet, le pôle de $\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, -z)$ en $Z = +1$ étant la seule singularité entourée par C_d ; elle double exactement la contribution du premier terme, comme l'annonçait déjà l'équation (167). Le troisième terme de (164), nous l'avons dit, est négligeable. Il reste

$$\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) \stackrel{d=2}{\underset{q \rightarrow +\infty}{=}} 2 \times \frac{\rho^{\text{sta}} \Delta}{2E_{\mathbf{q}}} \frac{\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, -E_{\mathbf{q}})}{S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, -E_{\mathbf{q}})} + O(\ln^\alpha / q^6) \quad (183)$$

en accord avec les équations (105) et (107) qu'il fallait démontrer.

B.3. Cas tridimensionnel

En dimension $d = 3$, nous parvenons là aussi à intégrer analytiquement⁶⁶ (169) et (171) :

$$\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) = \frac{q^3 \Delta}{(4\pi E_{\mathbf{q}})^2} \mathcal{F}(u = 2iv^{1/2} + i\sqrt{1+4v-2Z}), \quad (184)$$

$$S_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z) = \frac{mq}{8\pi\hbar^2} [(1+4v-2Z)^{1/2} - 2v^{1/2}]. \quad (185)$$

Pour arriver à une écriture compacte, il nous a fallu introduire⁶⁷

$$\mathcal{F}(u) = \frac{i\pi}{2} [\ln(u-1) - \ln(u+1) + \ln(1-u) - \ln(-1-u)]. \quad (186)$$

La fonction manquante $D_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}$ se déduit de (184) au travers de l'équation (174). Il reste à développer les restes $\delta\alpha(\mathbf{q}, z)$ et $\delta S_{12}(\mathbf{q}, z)$ en puissances de q^{-1} , ce qui est assez lourd. Pour voir jusqu'où il faut aller, repartons de l'expression utile (164) de la partie collective de la susceptibilité et analysons-la terme par terme et facteur par facteur, sachant que nous devons en déterminer jusqu'à l'ordre q^{-7} les parties qui sont singulières à la fois sur $\mathbb{R}^-$ et sur $\mathbb{R}^+$.

⁶⁶Expliquons notre calcul de $\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ assez retors. Après moyenne angulaire en coordonnées sphériques d'axe polaire $\mathbf{q}$, on étend l'intégrale radiale à $\mathbb{R}$ par parité formelle de l'intégrande puis on applique une méthode d'intégrale de contour. Plus précisément, après le changement de variable $k = qK$, on tombe sur l'intégrale

$$I_\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} dK K [\ln P(K) - \ln P(-K)] / Q(K)$$

avec les trinômes $P(K) = (K-1/2)^2 + v$ et $Q(K) = 2K^2 + 1/2 + 2v - Z$. En appelant $u = 1/2 + iv^{1/2}$ et $z_0 = (i/2)\sqrt{1+4v-2Z}$ les racines de P et de Q de partie imaginaire positive (les autres sont u^* et $-z_0$), en utilisant l'identité $\ln[(K-u)(K-u^*)] = \ln(K-u) + \ln(K-u^*) \forall K \in \mathbb{R}$, puis en décomposant $K/Q(K)$ en éléments simples, on trouve que

$$I_\alpha = (1/4) \int_{-\infty}^{+\infty} dK [(K+z_0)^{-1} + (K-z_0)^{-1}] \{ [\ln(K-u) - \ln(K+u^*)] + [\ln(K-u^*) - \ln(K+u)] \}.$$

Nous sommes ramené à des intégrales de la forme $J = \int_{-\infty}^{+\infty} dK [\ln(K-a) - \ln(K-b)] / (K-c)$ avec des parties imaginaires $\text{Im } a$ et $\text{Im } b$ non nulles de même signe. Nous calculons J par le théorème des résidus, en refermant le chemin d'intégration par un demi-cercle à l'infini dans le demi-plan complexe inférieur ($s = -1$) ou supérieur ($s = +1$) $P_s = P_{\mathcal{P}_{a,b}}$ ne contenant pas les lignes de coupure $a + \mathbb{R}^-$ et $b + \mathbb{R}^-$ des logarithmes. Alors $J = 0$ si $c \notin P_{\mathcal{P}_{a,b}}$ et $J = 2i\pi s [\ln(c-a) - \ln(c-b)]$ sinon.

⁶⁷Contrairement aux apparences, la fonction $\mathcal{F}(u)$ admet uniquement le segment $u \in [-1; 1]$ comme ligne de coupure (les discontinuités des deux premiers logarithmes à la traversée de l'intervalle $]-\infty, -1[$, ou celles des deux derniers à la traversée de l'intervalle $]1, +\infty[$, se compensent exactement). De toute façon, la variable u dans (184) n'atteint jamais l'axe réel lorsque Z décrit $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ car la racine carrée d'un nombre complexe $\notin \mathbb{R}^-$ est toujours de partie réelle strictement positive; la ligne de coupure de (184) est donc simplement celle de $\sqrt{1+4v-2Z}$, à savoir $[\frac{1}{2} + 2v, +\infty[$ comme il se doit.

- Le troisième terme de (164) est immédiatement d'ordre q^{-7} (voir le récapitulatif dans la table 1) et bilatéralement singulier; il requiert donc seulement la connaissance des ordres dominants $\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) \propto q^{-1}$ et $S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) \propto q^{+1}$. Nous pouvons faire dans (164) la substitution

$$-\frac{2\alpha(\mathbf{q}, z)\alpha(\mathbf{q}, -z)D_{12}(\mathbf{q}, z)}{S_{12}(\mathbf{q}, z)S_{12}(\mathbf{q}, -z)} \rightarrow -\frac{2\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, -z)D_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)}{S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, -z)}. \quad (187)$$

- La première singularité de $\alpha(\mathbf{q}, z)$ sur $\mathbb{R}^-$ apparaît à l'ordre q^{-4} , voir la note 69; nous l'appelons $\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)$. Elle n'épuise pas l'ordre requis sur $\alpha(\mathbf{q}, z)$, qui est q^{-5} (voir le récapitulatif dans la table 1); à cet ordre-là, nous trouverons également une contribution singulière sur $\mathbb{R}^-$, que nous noterons en toute logique $\alpha_{\text{sing}}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z)$ (l'indice « sdom » signifie « sous-dominant »).
- La première singularité de $S_{12}(\mathbf{q}, z)$ sur $\mathbb{R}^-$ apparaît à l'ordre q^{-6} , voir la note 69, ce qui va au-delà de l'ordre requis sur cette fonction; on peut donc l'oublier.
- Dans le premier terme de (164), nous pouvons donc à l'ordre q^{-7} remplacer $\alpha^2(\mathbf{q}, z)$ au numérateur par le double produit de la partie de $\alpha(\mathbf{q}, z)$ régulière sur $\mathbb{R}^-$ (écrite à l'ordre sous-dominant q^{-2}) et de la partie de $\alpha(\mathbf{q}, z)$ singulière sur $\mathbb{R}^-$ (écrite elle aussi à l'ordre sous-dominant q^{-5}); au dénominateur, nous pouvons limiter $S_{12}(\mathbf{q}, z)$ à l'ordre sous-dominant q^0 . D'où la substitution :

$$-\frac{\alpha^2(\mathbf{q}, z)}{S_{12}(\mathbf{q}, z)} \rightarrow -\frac{2[\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) + \alpha^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z)][\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) + \alpha_{\text{sing}}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z)]}{S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) + S_{12}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z)}. \quad (188)$$

- Nous pouvons faire exactement le même raisonnement et la même modification dans le deuxième terme de (164), il suffit de changer z en $-z$ dans (188). De toute façon, ce deuxième terme donne la même contribution que le premier à $\delta\tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ en vertu de l'équation (167); nous en tiendrons compte par un facteur 2.
- Les parties avec singularité sur $\mathbb{R}^-$ ne peuvent bien entendu provenir que des restes $\delta f(\mathbf{q}, z)$.

Pour alléger, nous ne donnons pas les développements assez longs de $\delta\alpha(\mathbf{q}, z)$ et de $\delta S_{12}(\mathbf{q}, z)$, qui ne sont après tout que des intermédiaires de calcul. Disons simplement que celui de $\delta\alpha(\mathbf{q}, z)$ commence à l'ordre q^{-2} et que le terme suivant est en q^{-4} (les deux termes sont des $O(1/|Z|)$ à l'infini); celui de $\delta S_{12}(\mathbf{q}, z)$ commence à l'ordre q^0 , avec un terme suivant en q^{-2} (le premier est indépendant de Z , le second est proportionnel à $1/(Z-1)$). Signalons aussi que la dépendance en v disparaît dans le regroupement de $\alpha^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ et de $\delta\alpha(\mathbf{q}, z)$ à l'ordre q^{-2} , et dans celui de $S_{12}^{\epsilon \rightarrow \xi}(\mathbf{q}, z)$ et de $\delta S_{12}(\mathbf{q}, z)$ à l'ordre q^0 , en vertu de l'égalité $\int_{\mathbb{R}^3} [d^3k/(2\pi)^3] (\epsilon_{\mathbf{k}}^{-1} - \xi_{\mathbf{k}}^{-1}) = (m/2\pi\hbar^2)(v^{1/2}q - a_{3D}^{-1})$ déduite de l'équation (12). Il reste finalement pour les parties qui sont régulières sur $\mathbb{R}^-$:

$$\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) = \frac{m^2\Delta}{4\pi^2\hbar^4} \left[F(Z) - \frac{\pi^2}{2} \right] q^{-1}, \quad \alpha^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z) = -\frac{m^2\Delta a_{3D}^{-1}}{2\pi\hbar^4} \frac{1}{Z-1} q^{-2}, \quad (189)$$

$$S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) = \frac{m}{8\pi\hbar^2} (1-2Z)^{1/2} q, \quad S_{12}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z) = -\frac{ma_{3D}^{-1}}{4\pi\hbar^2}. \quad (190)$$

Les contributions sous-sous-dominantes figurent dans la note 68 ci-dessous. Pour abrégé, on a introduit la fonction⁶⁸ $F(Z) = (i\pi/2)\ln[(\sqrt{1-2Z} + iZ)/(\sqrt{1-2Z} - iZ)] \quad \forall Z \in \mathbb{C} \setminus [1/2, +\infty[$, après

⁶⁸Dans $F(Z)$, l'argument du logarithme est un réel négatif $-x^2$, $x \geq 0$, donc se trouve sur la ligne de coupure du logarithme, si $Z = 1 - 2x/(1+x)^2$ (qui décrit $[1/2, 1]$ lorsque x décrit $\mathbb{R}^+$) ou si $Z = 1 + 2x/(x-1)^2$ (qui décrit $[1, +\infty[$ lorsque x décrit $\mathbb{R}^+$); on obtient donc la ligne de coupure annoncée $Z \in [1/2, +\infty[$, qui est aussi celle de la racine carrée sous le logarithme. Par ailleurs, on vérifie que $F(Z) = -\pi Z - \pi Z^2 + O(Z^3)$ lorsque $Z \rightarrow 0$ et surtout que $F(Z) - \pi^2/2 \sim -\pi(-2/Z)^{1/2} = O(1/|Z|^{1/2})$ lorsque $|Z| \rightarrow +\infty$. La seconde propriété permet de vérifier que le cercle à l'infini sur la figure 4 a une contribution nulle, donc que l'intégrale curviligne sur C_d des coefficients $\tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-n)}(Z)$ du développement (113) est nulle jusqu'à l'ordre $n = 5$. Pour que le lecteur puisse s'en convaincre, donnons la contribution du premier terme de (164) à ces coefficients :

$$\tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-3)}(Z) \Big|_{1\text{er}} = -\Delta^2 (m/2\pi\hbar^2)^3 [\pi^2 - 2F(Z)]^2 / \sqrt{1-2Z},$$

avoir montré que $\lim_{v \rightarrow 0^+} \mathcal{F}(2iv^{1/2} + i\sqrt{1+4v-2Z}) = \mathcal{F}(i\sqrt{1-2Z}) = F(Z) - \pi^2/2$ en vérifiant dans la seconde égalité que les fonctions ont même dérivée première par rapport à Z , à savoir $\pi/[(Z-1)\sqrt{1-2Z}]$, et même limite nulle en $Z = -\infty$. Nous trouvons pour les parties qui sont singulières sur $\mathbb{R}^-$ les ordres dominant et sous-dominant suivants⁶⁹ :

$$\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) = \frac{\rho^{\text{sta}} \Delta}{(2E_{\mathbf{q}})^2} \frac{1}{Z+1}, \quad (191)$$

$$\alpha_{\text{sing}}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{m^4 \Delta^3}{\pi^2 \hbar^8 q^5} \left\{ \frac{-1}{Z+1} \frac{\hbar^4 q}{2m^2 \Delta^2} \int_{\eta q}^{+\infty} dk_- k_-^2 \frac{2\Delta^2}{(2E_{\mathbf{k}})^2} + \int_{\eta}^{+\infty} \frac{dK_-}{K_-^2} \int_{u_m(K_-)}^1 \frac{du_-}{2} \frac{1+2K_- u_- + 2K_-^2}{(1+2K_- u_- + K_-^2)^2} \frac{1}{Z+1+2K_- u_- + 2K_-^2} \right\}, \quad (192)$$

où la densité ρ^{sta} est celle (17) de la théorie BCS statique à température nulle, η est le paramètre de coupure séparant la zone de proximité $k_- < \eta q$ de la zone asymptotique $k_- > \eta q, \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} > 0$ dans la méthode multiéchelle de la référence [5], on a remplacé $1 - \xi_{\mathbf{k}}/\epsilon_{\mathbf{k}}$ par son ordre dominant

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-4)}(Z) \Big|_{\text{1er}} &= -2\Delta^2 a_{3\text{D}}^{-1} (m/2\pi \hbar^2)^3 [\pi^2 - 2F(Z)] \{ [\pi^2 - 2F(Z)] / (1-2Z) + 4\pi / [(Z-1)\sqrt{1-2Z}] \}, \\ \tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-5)}(Z) \Big|_{\text{1er}} &= -4\Delta^2 (m/2\pi \hbar^2)^3 (1-2Z)^{-3/2} \{ a_{3\text{D}}^{-2} [2F(Z) - \pi^2 + 2\pi\sqrt{1-2Z}/(1-Z)]^2 \\ &\quad + (m\mu/\hbar^2) [2F(Z) - \pi^2] [2F(Z) - \pi^2 - 4\pi Z\sqrt{1-2Z}/(1-Z)^2] \}. \end{aligned}$$

Le calcul de $\tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-5)}(Z)$ requiert les parties sous-sous-dominantes $\alpha^{\text{ssdom}}(\mathbf{q}, z) = -(m^3 \Delta \mu / \pi \hbar^6 q^3) Z / [(Z-1)^2 \sqrt{1-2Z}]$ et $S_{12}^{\text{ssdom}}(\mathbf{q}, z) = -(m^2 \mu / 2\pi \hbar^4 q) (1-2Z)^{-1/2}$. De plus, les parties de $\tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-6)}(Z) \Big|_{\text{1er}}$ et de $\tilde{\chi}_{\text{coll}}^{(-7)}(Z) \Big|_{\text{1er}}$ régulières sur $\mathbb{R}^-$ sont $\sim 4\Delta^2 m^3 \rho^{\text{sta}} / \hbar^6 Z^2$ et $\sim -m^5 \Delta^4 / \hbar^{10} Z^3$ à l'infini donc tombent aussi sous le coup du raisonnement autour de la figure 4 et apportent une contribution nulle à $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$. Pour le voir, on développe à l'ordre requis dans la table 1 les parties régulières sur $\mathbb{R}^-$,

$$\alpha_{\text{reg}}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^3} [d^3 k / (2\pi)^3] \Delta(\epsilon_+ + \xi_+ + \epsilon_- + \xi_-) / 8\epsilon_+ \epsilon_- [z - (\epsilon_+ + \epsilon_-)]$$

et

$$S_{12}^{\text{reg}}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^3} [d^3 k / (2\pi)^3] \{ (4\epsilon_+)^{-1} + (4\epsilon_-)^{-1} + (\epsilon_+ + \xi_+)(\epsilon_- + \xi_-) / 4\epsilon_+ \epsilon_- [z - (\epsilon_+ + \epsilon_-)] \}.$$

Pour $q \rightarrow +\infty$ à Z fixé, il vient

$$S_{12}^{\text{reg}}(\mathbf{q}, z) = S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) + S_{12}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z) + S_{12}^{\text{ssdom}}(\mathbf{q}, z) - \rho^{\text{sta}} / [E_{\mathbf{q}}(Z-1)] + q^{-3} [\delta S_{12}^{\text{reg}(-3)}(Z) - (m^3 \mu^2 / \pi \hbar^6) (1-2Z)^{-3/2}] + O(q^{-4})$$

et

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{reg}}(\mathbf{q}, z) &= \alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) + \alpha^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z) + \alpha^{\text{ssdom}}(\mathbf{q}, z) - q^{-4} (m^2 \Delta / 3 \hbar^4) (Z-1)^{-3} [(3Z^2 + 5) \rho^{\text{sta}} + 4m\mu a_{3\text{D}}^{-1} / \pi \hbar^2] \\ &\quad + q^{-5} [\delta \alpha_{\text{reg}}^{(-5)}(Z) - (2m^4 \mu^2 \Delta / \pi \hbar^8) Z (Z^2 - 6Z + 3) (Z-1)^{-4} (1-2Z)^{-3/2}] + O(q^{-6}). \end{aligned}$$

Les fonctions $\delta S_{12}^{\text{reg}(-3)}(Z)$ et $\delta \alpha_{\text{reg}}^{(-5)}(Z)$ sont données par des intégrales difficiles du même type que (192), mais il suffit ici de montrer que $\delta S_{12}^{\text{reg}(-3)}(Z) \sim -m^3 \Delta^2 / \pi \sqrt{2} \hbar^6 (-Z)^{3/2}$ et $\delta \alpha_{\text{reg}}^{(-5)}(Z) \sim m^4 \Delta^3 / 4 \hbar^8 Z^2$ en distinguant les deux échelles $K_- = O(1)$ et $K_- \approx |Z|^{1/2}$.

⁶⁹Expliquons comment retrouver les puissances q^{-4} et q^{-5} correspondantes. Dans l'expression (168) de $\alpha(\mathbf{q}, z)$, décomposons l'intégrande en éléments simples pour la variable z et gardons la partie de dénominateur $z + \epsilon_+ + \epsilon_-$, seule susceptible d'être singulière sur $\mathbb{R}^-$, ce qui donne

$$\alpha_{\text{sing}}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^3} [d^3 k / (2\pi)^3] (\Delta/8) [\delta \epsilon_+ / (\epsilon_+ \epsilon_-) + \delta \epsilon_- / (\epsilon_- \epsilon_+)] (z + \epsilon_+ + \epsilon_-)^{-1}$$

avec $\delta \epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}$. Comme $\delta \epsilon_{\mathbf{k}} \approx 1/k^2$ à l'infini, la zone de proximité $k_- < \eta q$ de la méthode multiéchelle donne à l'ordre dominant en q^{-1} une contribution indépendante de la coupure η ,

$$\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z) = 2 \int_{\mathbb{R}^3} [d^3 k_- / (2\pi)^3] (\Delta/8) (\delta \epsilon_- / \epsilon_-) / [E_{\mathbf{q}}^2(Z+1)];$$

on retrouve l'équation (191). La zone asymptotique, dans laquelle $q \rightarrow +\infty$ à $\mathbf{K} = \mathbf{k}/q$ fixé, est évidemment d'ordre dominant q^{-5} puisque $d^3 k$ sort un facteur q^3 , $\delta \epsilon_- / \epsilon_- \epsilon_+$ sort un facteur q^{-6} et le dénominateur d'énergie $z + \epsilon_+ + \epsilon_-$ est d'ordre q^2 ; le résultat dépend cependant de la coupure η , d'une façon qui est compensée par une contribution sous-dominante de la zone de proximité comme dans (192). Le même raisonnement sur l'expression (170) de $S_{12}(\mathbf{q}, z)$ conduit à une partie singulière sur $\mathbb{R}^-$ donnée par $S_{12}^{\text{sing}}(\mathbf{q}, z) = \int_{\mathbb{R}^3} [d^3 k / (2\pi)^3] (-1/4) (\delta \epsilon_+ \delta \epsilon_- / \epsilon_+ \epsilon_-) (z + \epsilon_+ + \epsilon_-)^{-1}$ d'ordre dominant q^{-6} sur la zone de proximité et q^{-7} sur la zone asymptotique.

$2\Delta^2/(2E_{\mathbf{k}})^2$ dans la première intégrale, et l'on a posé $u_m(K) = \max(-1, -1/2K)$ dans la seconde intégrale comme dans [5, section 4.3.5.4] (u_- est le cosinus de l'angle entre les vecteurs $\mathbf{q}$ et $\mathbf{k}_-$ et l'on a $\mathbf{K}_- = \mathbf{k}_-/q$). En étendant l'astuce bidimensionnelle de la note 50 à l'intégrale auxiliaire tridimensionnelle

$$J = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3K}{(K_+^2 + \varepsilon^2)^2 (K_-^2 + \varepsilon^2)^2} \frac{K_+^2 + K_-^2}{Z + K_+^2 + K_-^2} \quad (193)$$

(ici $\mathbf{K}_{\pm} = \mathbf{K} \pm \hat{\mathbf{q}}/2$ avec $\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/q$ la direction du vecteur $\mathbf{q}$) puis en calculant cette intégrale à un $o(1)$ près lorsque $\varepsilon \rightarrow 0^+$ par la méthode de la note 66, nous aboutissons à l'expression explicite⁷⁰

$$\alpha_{\text{sing}}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z) = \frac{m^4 \Delta^3}{\pi^2 \hbar^8 q^5} \left[\frac{\pi \sqrt{1+2Z}}{2Z(Z+1)^2} - \frac{F(-Z)}{2Z^2} \right] \quad (194)$$

singulière sur l'intervalle $Z \in]-\infty, -1/2]$ mais dont on vérifie l'absence de pôle en $Z = 0$ au moyen de la note 68, qui donne le comportement de $F(Z)$ en $Z = 0$.

Pour résumer, à l'ordre q^{-5} et en nous souvenant de l'expression par intégrale curviligne à température nulle $\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) = \int_{C_d} \frac{dz}{(-2i\pi)} \tilde{\chi}_{\text{coll}}(\mathbf{q}, z)$, nous pouvons identifier trois contributions dans la transformée de Fourier de la partie collective $\delta g_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (52) des fonctions de distribution de paires.

- (i) La contribution de la partie singulière dominante $\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)$ dans le premier terme de (164) simplifié comme dans l'équation (188); comme la singularité n'est qu'un pôle simple en $Z = -1$, nous refermons le contour d'intégration C_d comme sur la figure 4 pour entourer le pôle. Le théorème des résidus donne alors

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})|_{(i)} = 2 \times E_{\mathbf{q}} \times \frac{2[\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z = -E_{\mathbf{q}}) + \alpha_{\text{sing}}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z = -E_{\mathbf{q}})]}{S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z = -E_{\mathbf{q}}) + S_{12}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, z = -E_{\mathbf{q}})} \frac{\rho^{\text{sta}} \Delta}{(2E_{\mathbf{q}})^2}. \quad (195)$$

Le facteur 2 tient compte du doublement par le deuxième terme de (164) et le facteur $E_{\mathbf{q}}$ est le jacobien du changement de variable $z = E_{\mathbf{q}} Z$. Les valeurs des fonctions en $Z = -1$ s'obtiennent facilement si l'on sait que $F(-1) = \pi^2/6$ (voir l'équation (200)), si bien que

$$\begin{aligned} \delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})|_{(i)} &= -\frac{2\rho^{\text{sta}} m^2 \Delta^2}{\hbar^4 q^4} \left[\frac{1}{12} - \frac{1}{4\pi a_{3D} q} + O(q^{-2}) \right] \\ &= -2 \left(\frac{m\Delta}{\hbar^2 q^2} \right)^2 \rho^{\text{sta}} \left[\frac{2\pi}{3\sqrt{3}} + \left(\frac{4\pi}{9} - \frac{2\sqrt{3}}{3} \right) (q a_{3D})^{-1} + O(q^{-2}) \right]. \end{aligned} \quad (196)$$

- (ii) La contribution de la partie singulière sous-dominante $\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, z)$ dans la forme simplifiée (188); comme ses singularités dans le plan complexe sont une ligne de coupure sur $Z \in]-\infty, -1/2]$ et un pôle en $Z = -1$, nous préférons garder le contour d'origine C_d , en l'écrasant cependant sur l'intervalle $Z \in [1/2, +\infty[$ pour se ramener à une variable d'intégration réelle $\epsilon \in [1/2, +\infty[$ (on pose $Z = \epsilon \pm i0^+$ et on utilise l'identité $\tilde{\chi}(\epsilon + i0^+) - \tilde{\chi}(\epsilon - i0^-) = 2i \text{Im} \tilde{\chi}(\epsilon + i0^+)$):

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})|_{(ii)} = 2 \times E_{\mathbf{q}} \times \int_{1/2}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{\pi} \text{Im} \left(\frac{2\alpha_{\text{sing}}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, Z = \epsilon + i0^+)}{S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, Z = \epsilon + i0^+)} \right) \alpha_{\text{sing}}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, Z = \epsilon) \quad (197)$$

⁷⁰Si l'on passe à côté de cette astuce, on peut toujours calculer analytiquement $\text{Im}[\alpha_{\text{sing}}^{\text{sdom}}(\mathbf{q}, Z = \epsilon + i0^+)]$ sur son support $\epsilon \in]-\infty, -1/2]$ en utilisant la relation $\text{Im}[1/(x + i0^+)] = -\pi \delta(x)$ sous le signe intégral dans (192) puis en prenant la limite $\eta \rightarrow 0^+$ au sens des distributions. Il reste alors à refermer le contour d'intégration sur C_g comme dans la note 60. Ceci conduit à une expression équivalente mais bien plus compliquée de l'intégrale (202) à venir,

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= 4\phi(-1) - \int_{-\infty}^{-3/2} d\epsilon \frac{\phi(\epsilon)}{(1+\epsilon)^2} - \int_{-1/2}^{+1/2} \frac{d(\delta\epsilon)}{2(\delta\epsilon)^2} [\phi(-1+\delta\epsilon) + \phi(-1-\delta\epsilon) - 2\phi(-1)] \\ &\quad + \int_{-\infty}^{-1/2} d\epsilon \phi(\epsilon) \left[\frac{1}{2\epsilon^2} \ln \frac{\epsilon + \sqrt{-1-2\epsilon}}{\epsilon - \sqrt{-1-2\epsilon}} - \frac{1}{\epsilon(\sqrt{-1-2\epsilon} - \epsilon)} \right] \end{aligned}$$

avec $\phi(\epsilon) = [\pi^2/2 - F(\epsilon)]/\sqrt{1-2\epsilon}$.

où le facteur $2 \times E_{\mathbf{q}}$ a même origine que dans (195).

- (iii) La contribution du troisième terme de (164) simplifié comme dans l'équation (187); nous nous ramenons à une variable d'intégration réelle comme au point (ii) pour obtenir :

$$\delta \tilde{g}_{\text{coll}}(\mathbf{q})|_{\text{(iii)}} = E_{\mathbf{q}} \times \int_{1/2}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{\pi} \frac{2\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, Z = -\epsilon)}{S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, Z = -\epsilon)} \text{Im} \left(\frac{\alpha^{\text{dom}}(\mathbf{q}, Z = \epsilon + i0^+) D_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, Z = \epsilon + i0^+)}{S_{12}^{\text{dom}}(\mathbf{q}, Z = \epsilon + i0^+)} \right) \quad (198)$$

en se souvenant que les ordres dominants de α et de S_{12} sont des fonctions régulières sur $\mathbb{R}^-$ et que la fonction $D_{12}(\mathbf{q}, z)$ est reliée à $\alpha(\mathbf{q}, z)$ par l'équation (174).

On peut calculer les parties imaginaires et plus généralement les intégrandes dans (197) et (198) au moyen des relations suivantes :

$$F(\epsilon + i0^+) \stackrel{\epsilon > 1/2}{=} \frac{i\pi}{2} \ln \left[-\frac{\epsilon - \sqrt{2\epsilon - 1}}{\epsilon + \sqrt{2\epsilon - 1}} \left(1 + \frac{2i0^+}{(\epsilon - 1)\sqrt{2\epsilon - 1}} \right) \right] = \frac{i\pi}{2} \ln R(\epsilon) + \frac{\pi^2}{2} \text{sgn}(\epsilon - 1), \quad (199)$$

$$F(-\epsilon) \stackrel{\epsilon > -1/2}{=} \frac{\pi^2}{2} - \pi \arctan \frac{\sqrt{1 + 2\epsilon}}{\epsilon} = \pi \arctan \left(\frac{\epsilon}{\sqrt{1 + 2\epsilon}} \right), \quad (200)$$

où sgn est la fonction signe et l'on a posé $R(\epsilon) = (\epsilon - \sqrt{2\epsilon - 1})/(\epsilon + \sqrt{2\epsilon - 1}) \geq 0 \quad \forall \epsilon > 1/2$. En regroupant les trois contributions (196)–(198), nous aboutissons au développement asymptotique annoncé (105), avec l'expression de la constante numérique dans le coefficient (106) de q^{-5} :

$$\mathcal{D} = \frac{2}{\pi^3} (\mathcal{J} + \mathcal{J}) \quad (201)$$

où l'intégrale $\mathcal{J}$ provient du point (ii) et l'intégrale $\mathcal{J}$ provient du point (iii) :

$$\mathcal{J} = \int_{1/2}^1 d\epsilon \left[\frac{F(-\epsilon)}{2\epsilon^2} - \frac{\pi\sqrt{1+2\epsilon}}{2\epsilon(\epsilon+1)^2} \right] \frac{2\pi}{\sqrt{2\epsilon-1}}, \quad (202)$$

$$\mathcal{J} = \int_{1/2}^1 d\epsilon \frac{[\pi^2/2 - F(-\epsilon)][-\pi^2/2 - F(-\epsilon)]}{\epsilon\sqrt{2\epsilon-1}\sqrt{2\epsilon+1}} + \int_{1/2}^{+\infty} d\epsilon \frac{[\pi^2/2 - F(-\epsilon)] \ln^2 R(\epsilon)}{4\epsilon\sqrt{2\epsilon-1}\sqrt{2\epsilon+1}}. \quad (203)$$

Nous nous contentons ici d'un calcul numérique de ces constantes :

$$\mathcal{J} = 0,985834..., \quad \mathcal{J} = -9,507704... \quad (204)$$

Signalons cependant (sans le mener jusqu'au bout) la possibilité d'un calcul analytique. D'abord, on fait disparaître les racines carrées par le changement de variable $\epsilon = (t^2 + 1/t^2)/4$ où $t \geq 1$; alors $\sqrt{1+2\epsilon} = (t+1/t)/\sqrt{2}$ et $\sqrt{2\epsilon-1} = (t-1/t)/\sqrt{2}$. Ensuite, on remarque que le numérateur et le dénominateur de la fraction sous le logarithme dans la définition de $F(Z)$ sont des carrés, par exemple $\sqrt{1-2Z} + iZ = (\sqrt{1-2Z} + i)^2/(2i)$. Ceci permet d'écrire $F(-\epsilon)$ sous la forme

$$F(-\epsilon) = \frac{\pi^2}{2} + i\pi [\ln(t + i\alpha) + \ln(t - i\beta) - \ln(t - i\alpha) - \ln(t + i\beta)] \quad \text{où} \quad \alpha = \beta^{-1} = \frac{\sqrt{2} + \sqrt{6}}{2}. \quad (205)$$

On ramène donc (202) à une intégrale de la forme $\int dt R(t) \ln(t-a)$ avec $\text{Im } a \neq 0$ puis, en décomposant la fraction rationnelle $R(t)$ en éléments simples sur $\mathbb{C}$, à $\int dt \ln(t-a)/(t-z)$ avec $\text{Im } z \neq 0$ et $z \neq a$, pour laquelle une primitive (continue sur $\mathbb{R}$) est connue⁷¹ :

$$\int dt \frac{\ln(t-a)}{t-z} = g_2 \left(\frac{t-a}{z-a} \right) - g_1 \left(\frac{t-a}{z-a} \right) [\ln(t-a) - \ln(z-a)] + \ln(z-a) \ln(t-z). \quad (206)$$

Ici g_n est une fonction de Bose ou polylogarithme. Ceci suffit pour $\mathcal{J}$. La même méthode conduit, pour la première intégrale $\mathcal{J}_1$ dans (203), à $\int \ln(t-a) \ln(t-b)/(t-z)$, pour laquelle une primitive (pas nécessairement continue) est donnée par le calcul formel (nous ne la recopions pas ici). La

⁷¹Si $a_l/(a_l - z_l) > 1$, l'argument des polylogarithmes franchit leur ligne de coupure $[1, +\infty[$ en $t_0 = (a_l z_R - a_R z_l)/(a_l - z_l)$, mais les discontinuités de g_2 et de g_1 qui s'ensuivent se compensent dans (206). Ici a_R, z_R et a_l, z_l sont les parties réelles et les parties imaginaires de a, z .

seconde intégrale dans (203) est plus coriace ; grâce à l'invariance par les transformations $t \rightarrow 1/t$ et $t \rightarrow -t$, on arrive à l'écrire comme une intégrale sur l'axe réel tout entier,

$$\mathcal{J}_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{(-i\pi t)}{1+t^4} \left\{ [\ln(t+i\alpha) - \ln(t+i\beta)] + [\ln(t-i\beta) - \ln(t-i\alpha)] \right\} \ln^2 \frac{|t-\alpha||t+\beta|}{|t+\alpha||t-\beta|} \quad (207)$$

où nous avons regroupé les logarithmes dont les arguments ont des parties imaginaires de même signe. Il reste à appliquer la méthode de contour de la note 66, après avoir exprimé $\ln|x|$ en termes d'une fonction logarithme complexe

$$\ln|x| = \ln(x+i0^+) - i\pi Y(-x) = \ln(x-i0^+) + i\pi Y(-x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^* \quad (208)$$

et avoir choisi le signe $\pm$ pour que toutes les lignes de coupure des logarithmes soient dans le même demi-plan complexe inférieur ou supérieur. La partie non analytique de (208) mettant en jeu la fonction de Heaviside échappe au théorème des résidus, mais se ramène à une intégrale d'un produit de deux fonctions logarithmes sur un intervalle semi-infini de $\mathbb{R}$, que l'on sait calculer comme dans $\mathcal{J}_1$.

Annexe C. Comportement à courte distance de certaines intégrales de Fourier

On considère une fonction $\tilde{\phi}(\mathbf{q})$ de $\mathbb{R}^d$ dans $\mathbb{C}$ isotrope, de module intégrable, de comportement asymptotique (105). On demande comment varie sa transformée de Fourier inverse

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (209)$$

à l'ordre r^2 , c'est-à-dire à un $o(r^2)$ près, au voisinage de $\mathbf{r} = \mathbf{0}$. Dans la suite, on omettra l'indice « coll » sur les coefficients de (105) pour alléger et pour universaliser.

C.1. Cas bidimensionnel

En dimension $d = 2$, on se ramène après moyenne angulaire et soustraction de $\phi(\mathbf{0})$ à l'intégrale suivante :

$$\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}) = \int_0^{+\infty} \frac{q dq}{2\pi} [J_0(qr) - 1] \tilde{\phi}(q). \quad (210)$$

Nous ne pouvons pas remplacer froidement $J_0(qr) - 1$ par son approximation quadratique $-(qr)^2/4$ sous le signe intégral sans déclencher une divergence ultraviolette logarithmique. Après réflexion, nous introduisons deux paramètres de coupure fixés $Q \gg 1$ et $0 < \eta \ll 1$, nous séparons l'intervalle d'intégration en trois sous-intervalles $I_1 = [0, Q]$, $I_2 = [Q, \eta/r]$ et $I_3 = [\eta/r, +\infty[$ et nous utilisons dans la limite $r \rightarrow 0^+$ trois approximations différentes de l'intégrande de (210) adaptées à chaque intervalle. Il restera ensuite à prendre la limite $Q \rightarrow +\infty$ et $\eta \rightarrow 0^+$ dans les coefficients du développement obtenu. Sur l'intervalle I_1 , nous quadratisons $J_0(qr) - 1$; l'erreur commise est un $O(r^4)$ négligeable. Sur l'intervalle $I_2 \cup I_3$, nous pouvons remplacer $\tilde{\phi}(q)$ par le terme dominant en q^{-4} dans (105) ; puisque $J_0(qr) - 1 = O((qr)^2)$, l'erreur commise est un $O(r^2/Q^2)$ (à des facteurs $\ln Q$ près) donc affecte le coefficient de r^2 par un $O(1/Q^2)$ négligeable. Toujours sur $I_2 \cup I_3$, nous effectuons ensuite le changement de variable $x = qr$, ce qui fait sortir un facteur global r^2 ,

$$\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0})|_{I_2 \cup I_3} \simeq \frac{Cr^2}{2\pi} \int_{Qr}^{+\infty} \frac{dx \ln(Ax/r)}{x^3 \ln(Bx/r)} [J_0(x) - 1]. \quad (211)$$

Dans l'intégrale sur x restante, nous pouvons alors passer à la limite $r \rightarrow +\infty$, donc dire que $\ln(Ax/r)/\ln(Bx/r) \rightarrow 1$ si $x \in [\eta, +\infty[$ (l'erreur commise est un $o(1)$), et approximer $J_0(x) - 1$ par

$-x^2/4$ si $Qr < x < \eta$ (ceci introduit une erreur $O(\eta^2)$ négligeable). Il reste deux intégrales que l'on sait étudier lorsque $\eta \ll 1$ ou $r \rightarrow 0^+$:

$$\begin{aligned} \int_{\eta}^{+\infty} \frac{dx}{x^3} [J_0(x) - 1] &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\theta \left[-\frac{1 - \cos(\eta \cos \theta)}{2\eta^2} - \frac{1}{2\eta} \sin(\eta \cos \theta) \cos \theta \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \text{Ci}(\eta \cos \theta) \cos^2 \theta \right] \quad (212) \\ &\stackrel{\eta \rightarrow 0^+}{=} \frac{1}{4} (-1 - \ln 2 + \gamma + \ln \eta) + O(\eta^2) \end{aligned}$$

(nous avons utilisé la représentation intégrale $J_0(x) = (2/\pi) \text{Re} \int_0^{\pi/2} d\theta \exp(ix \cos \theta)$, interverti l'intégration sur x et sur θ , intégré deux fois par parties dans l'intégrale sur x pour passer de x^3 à x au dénominateur, reconnu la fonction cosinus intégral Ci, utilisé son développement en l'origine et l'identité $(2/\pi) \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2 \theta \ln(\cos \theta) = (1 - 2 \ln 2)/4$)

$$\begin{aligned} \int_{Qr}^{\eta} \frac{dx}{x^3} \frac{\ln(Ax/r)}{\ln(Bx/r)} \left(-\frac{1}{4} x^2 \right) &= \frac{1}{4} \ln\left(\frac{Qr}{\eta}\right) - \frac{1}{4} \ln\left(\frac{A}{B}\right) \ln\left[\frac{\ln(\eta B/r)}{\ln(QB)}\right] \\ &\stackrel{r \rightarrow 0^+}{=} \frac{1}{4} \ln\left(\frac{Qr}{\eta}\right) - \frac{1}{4} \ln\left(\frac{A}{B}\right) \left[\ln \ln\left(\frac{B}{r}\right) - \ln \ln(QB) \right] + O\left(\frac{1}{\ln r}\right) \quad (213) \end{aligned}$$

(nous avons eu recours au changement de variable $u = \ln x$). La dépendance en η disparaît dans la somme de (212) et (213). Pour faire disparaître la dépendance en Q dans la limite $Q \rightarrow +\infty$, il faut revenir à la contribution de l'intervalle I_1 ; nous la transformons par astuce moins-plus comme suit :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0})|_{I_1} &\simeq -\frac{r^2}{8\pi} \int_0^Q dq q^3 \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \\ &= -\frac{r^2}{8\pi} \int_0^Q dq q \left[q^2 \tilde{\phi}(\mathbf{q}) - \frac{C}{q^2 + q_0^2} \frac{\ln[A^2(q^2 + q_0^2)]}{\ln[B^2(q^2 + q_0^2)]} \right] \\ &\quad - \frac{Cr^2}{8\pi} \int_0^Q \frac{q dq}{q^2 + q_0^2} \frac{\ln[A^2(q^2 + q_0^2)]}{\ln[B^2(q^2 + q_0^2)]} \quad (214) \\ &\stackrel{Q \rightarrow +\infty}{=} -\frac{r^2}{4} \mathcal{J}_{2D} - \frac{Cr^2}{8\pi} \left[\ln\left(\frac{Q}{q_{\text{dim}}}\right) + \ln\left(\frac{A}{B}\right) \ln \ln(QB) \right] + O\left(\frac{\ln^\alpha Q}{Q^2}\right) \end{aligned}$$

(la dernière intégrale au troisième membre se calcule au moyen du changement de variable $u = \ln(q^2 + q_0^2)$). Ici $q_0 > 1/B$ est un nombre d'onde de référence arbitraire, q_{dim} est le nombre d'onde de dimère (8) et l'on a posé

$$\mathcal{J}_{2D} = \int_0^{+\infty} \frac{q dq}{2\pi} \left[q^2 \tilde{\phi}(\mathbf{q}) - \frac{C}{q^2 + q_0^2} \frac{\ln[A^2(q^2 + q_0^2)]}{\ln[B^2(q^2 + q_0^2)]} \right] - \frac{C}{2\pi} \left[\ln \frac{q_0}{q_{\text{dim}}} + \ln\left(\frac{A}{B}\right) \ln \ln(Bq_0) \right]. \quad (215)$$

C'est une quantité bien définie au vu du comportement asymptotique (105) de $\tilde{\phi}(\mathbf{q})$; elle est de plus indépendante de q_0 tant que $q_0 > 1/B$ (on vérifie aisément que sa dérivée par rapport à q_0 est identiquement nulle). Finalement, après regroupement des contributions des trois intervalles, le paramètre de coupure Q disparaît et il reste le comportement quadratique cherché :

$$\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}) \stackrel{d=2}{\underset{r \rightarrow 0^+}{\simeq}} \frac{1}{4} r^2 \left\{ -\mathcal{J}_{2D} + \frac{C}{2\pi} \left[-1 + \gamma + \ln(q_{\text{dim}} r/2) - \ln\left(\frac{A}{B}\right) \ln(-\ln(r/B)) \right] + o(1) \right\}. \quad (216)$$

On peut simplifier un peu en remplaçant $\ln(-\ln(r/B))$ par $\ln(-\ln(q_{\text{dim}} r))$, car ceci introduit une correction en $O[\ln(q_{\text{dim}} B)/\ln(q_{\text{dim}} r)]$ absorbable dans le $o(1)$.

C.2. Cas tridimensionnel

En dimension $d = 3$, nous nous réduisons par isotropie à

$$\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}) = \int_0^{+\infty} \frac{q^2 dq}{2\pi^2} \left(\frac{\sin(qr)}{qr} - 1 \right) \tilde{\phi}(\mathbf{q}). \quad (217)$$

Après réflexion, nous trouvons qu'il suffit de couper l'intervalle d'intégration en deux parties seulement, au moyen de la coupure Q . Sur la partie basse $q \in [0, Q]$, nous pouvons remplacer $\sin(qr)/(qr) - 1$ par son approximation quadratique $-(qr)^2/6$; l'erreur commise est un $O(r^4)$ négligeable. Sur la partie haute, nous pouvons remplacer $\tilde{\phi}(\mathbf{q})$ par son comportement asymptotique (105); comme $\sin(qr)/(qr) - 1 = O[(qr)^2]$, l'erreur commise $\int_Q^{+\infty} O(r^2/q^2) dq = O(r^2/Q)$ est sans effet sur le coefficient de r^2 lorsque $Q \rightarrow +\infty$. Sur la partie basse, appliquons immédiatement une astuce moins-plus pour préparer l'élimination de Q dans la limite où il tend vers l'infini :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0})|_{q < Q} &\simeq -\frac{r^2}{6} \int_0^Q \frac{q^2 dq}{2\pi^2} q^2 \left[\tilde{\phi}(\mathbf{q}) - \frac{C}{(q^2 + q_0^2)^2} - \frac{Dq}{(q^2 + q_0^2)^3} \right] \\ &\quad - \frac{r^2}{6} \int_0^Q \frac{q^2 dq}{2\pi^2} q^2 \left[\frac{C}{(q^2 + q_0^2)^2} + \frac{Dq}{(q^2 + q_0^2)^3} \right] \quad (218) \\ &\stackrel{Q \rightarrow +\infty}{=} -\frac{r^2}{6} \left[\mathcal{J}_{3D} + \frac{QC}{2\pi^2} + \frac{D}{2\pi^2} \ln\left(\frac{Q}{k_\Delta}\right) - \frac{3D}{8\pi^2} + O(Q^{-1}) \right] \end{aligned}$$

où nous avons posé

$$\mathcal{J}_{3D} = \int_0^{+\infty} \frac{q^2 dq}{2\pi^2} q^2 \left[\tilde{\phi}(\mathbf{q}) - \frac{C}{(q^2 + q_0^2)^2} - \frac{Dq}{(q^2 + q_0^2)^3} \right] - \frac{3q_0 C}{8\pi} - \frac{D}{2\pi^2} \ln\left(\frac{q_0}{k_\Delta}\right) \quad (219)$$

et $k_\Delta = (m\Delta/\hbar^2)^{1/2}$, avec $q_0 > 0$ un nombre d'onde arbitraire dont le rôle est d'éviter une divergence infrarouge. On vérifie que $d\mathcal{J}_{3D}/dq_0 \equiv 0$ donc que $\mathcal{J}_{3D}$ est indépendant de q_0 . Sur la partie haute $q \in [Q, +\infty[$, nous obtenons après changement de variable $x = qr$ puis passage à la limite $r \rightarrow 0^+$ à Q fixé :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0})|_{q > Q} &\simeq \frac{Cr}{2\pi^2} \int_{Qr}^{+\infty} \frac{dx}{x^2} \left(\frac{\sin x}{x} - 1 \right) + \frac{Dr^2}{2\pi^2} \int_{Qr}^{+\infty} \frac{dx}{x^3} \left(\frac{\sin x}{x} - 1 \right) \\ &\stackrel{r \rightarrow 0^+}{=} \frac{Cr}{2\pi^2} \left[-\frac{\pi}{4} + \frac{1}{6} Qr + O(r^3) \right] + \frac{Dr^2}{2\pi^2} \left[\frac{-11 + 6\gamma + 6\ln(Qr)}{36} + O(r^2) \right] \quad (220) \end{aligned}$$

(dans la seconde égalité, nous avons exprimé les intégrales sur x en termes des fonctions spéciales sinus intégral et cosinus intégral, puis utilisé les développements connus de ces fonctions en l'origine). Il reste à sommer (218) et (220) pour obtenir le comportement quadratique cherché, indépendant de Q comme il se doit :

$$\boxed{\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}) \stackrel{d=3}{\underset{r \rightarrow 0^+}{=}} -\frac{Cr}{8\pi} + \frac{1}{6} r^2 \left[-\mathcal{J}_{3D} + \frac{D}{2\pi^2} \left(-\frac{13}{12} + \gamma + \ln(k_\Delta r) \right) + o(1) \right].} \quad (221)$$

Références

- [1] J. C. Obeso-Jureidini et V. Romero-Rochín, « Density correlation functions and the spatial structure of the two-dimensional BEC-BCS crossover », *Phys. Rev. A* **105** (2022), article no. 043307 (14 pages).
- [2] J. C. Obeso-Jureidini et V. Romero-Rochín, « Spatial structure of the pair wave function and the density correlation functions throughout the BEC-BCS crossover », *Phys. Rev. A* **101** (2020), article no. 033619 (10 pages).
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper et J. R. Schrieffer, « Theory of Superconductivity », *Phys. Rev.* **108** (1957), p. 1175-1204.
- [4] N. N. Bogoliubov, « K teorii sverkhtekuchesti », *Izv. Akad. Nauk, Ser. Fiz.* **11** (1947), p. 77. [Version anglaise : « On the theory of superfluidity », *J. Phys. (URSS)* **11**, 23 (1947)].

- [5] Y. Castin, *Condensats de Bose–Einstein – La théorie, des fondements aux applications, Tome II*, EDP Sciences; CNRS Éditions, 2025.
- [6] O. Penrose et L. Onsager, « Bose–Einstein Condensation and Liquid Helium », *Phys. Rev.* **104** (1956), p. 576-584.
- [7] A. J. Leggett, *Quantum Liquids – Bose Condensation and Cooper Pairing in Condensed-Matter Systems*, Oxford University Press, 2006.
- [8] H. Kurkjian, Y. Castin et A. Sinatra, « Phase operators and blurring time of a pair-condensed Fermi gas », *Phys. Rev. A* **88** (2013), article no. 063623 (16 pages).
- [9] N. N. Bogoliubov, V. V. Tolmachev et D. V. Shirkov, *New Method in the Theory of Superconductivity*, Académie des Sciences de l'U.R.S.S., 1958.
- [10] P. W. Anderson, « Random-Phase Approximation in the Theory of Superconductivity », *Phys. Rev.* **112** (1958), p. 1900-1916.
- [11] A. Minguzzi, G. Ferrari et Y. Castin, « Dynamic structure factor of a superfluid Fermi gas », *Eur. Phys. J. D, Atomic Mol. Opt. Plasma Phys.* **17** (2001), no. 1, p. 49-55.
- [12] H. Kurkjian, Y. Castin et A. Sinatra, « Brouillage thermique d'un gaz cohérent de fermions », *Comptes Rendus. Physique* **17** (2016), no. 7, p. 789-801. [Version anglaise : « Thermal blurring of a coherent Fermi gas », hal-01118346 v4 (2016), en ligne sur <https://hal.science/hal-01118346>].
- [13] H. Kurkjian, *Cohérence, brouillage et dynamique de phase dans un condensat de paires de fermions*, ENS – Université PSL (France), 2016. Thèse de doctorat.
- [14] I. Carusotto et Y. Castin, « Coherence and correlation properties of a one-dimensional attractive Fermi gas », *Opt. Commun.* **243** (2004), p. 81-106.
- [15] M. Gaudin, *La fonction d'onde de Bethe*, Masson, 1983.
- [16] J.-P. Blaizot et G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, MIT Press, 1985.
- [17] Y. Castin, « Basic theory tools for degenerate Fermi gases », dans *Ultra-cold Fermi Gases* (M. Inguscio, W. Ketterle et C. Salomon, eds.), Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", t. 164, IOS Press; Società italiana di fisica, 2007, p. 289-349.
- [18] C. Mora et Y. Castin, « Extension of Bogoliubov theory to quasicondensates », *Phys. Rev. A* **67** (2003), article no. 053615 (24 pages).
- [19] M. Marini, F. Pistolesi et G. C. Strinati, « Evolution from BCS superconductivity to Bose condensation : analytic results for the crossover in three dimensions », *Eur. Phys. J. B, Condens. Matter Complex Syst.* **1** (1998), no. 2, p. 151-159.
- [20] Y. Castin et H. Kurkjian, « Branche d'excitation collective du continuum dans les gaz de fermions condensés par paires : étude analytique et lois d'échelle », *Comptes Rendus. Physique* **21** (2020), no. 3, p. 253-310. [Version anglaise : « Collective excitation branch in the continuum of pair-condensed Fermi gases : analytical study and scaling laws », hal-02196152 v2 (2020), en ligne sur <https://hal.science/hal-02196152>].
- [21] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of integrals, series, and products*, Academic Press Inc., 1994.
- [22] M. Randeria, J.-M. Duan et L.-Y. Shieh, « Superconductivity in a two-dimensional Fermi gas : Evolution from Cooper pairing to Bose condensation », *Phys. Rev. B* **41** (1990), p. 327-343.
- [23] R. Combescot, M. Y. Kagan et S. Stringari, « Collective mode of homogeneous superfluid Fermi gases in the BEC-BCS crossover », *Phys. Rev. A* **74** (2006), article no. 042717 (14 pages).
- [24] S. Van Loon et C. A. R. Sá de Melo, « Effects of Quantum Fluctuations on the Low-Energy Collective Modes of Two-Dimensional Superfluid Fermi Gases from the BCS to the Bose Limit », *Phys. Rev. Lett.* **131** (2023), article no. 113001 (7 pages).
- [25] M. Randeria, « Crossover from BCS Theory to Bose–Einstein Condensation », dans *Bose–Einstein Condensation* (A. Griffin, D. W. Snoke et S. Stringari, eds.), Cambridge University Press, 1995, p. 355-392.
- [26] D. S. Petrov, C. Salomon et G. V. Shlyapnikov, « Weakly Bound Dimers of Fermionic Atoms », *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004), article no. 090404 (4 pages).
- [27] I. V. Brodsky, A. V. Klaptsov, M. Y. Kagan, R. Combescot et X. Leyronas, « Bound states of three and four resonantly interacting particles », *Pis'ma v ZhETF* **82** (2005), p. 306-311.
- [28] R. B. Diener, R. Sensarma et M. Randeria, « Quantum fluctuations in the superfluid state of the BCS-BEC crossover », *Phys. Rev. A* **77** (2008), article no. 023626 (21 pages).
- [29] M. Schick, « Two-Dimensional System of Hard-Core Bosons », *Phys. Rev. A* **3** (1971), p. 1067-1073.
- [30] V. N. Popov, *Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics*, Reidel Publishing Company, 1983.
- [31] L. He, H. Lü, G. Cao, H. Hu et X.-J. Liu, « Quantum fluctuations in the BCS-BEC crossover of two-dimensional Fermi gases », *Phys. Rev. A* **92** (2015), article no. 023620 (15 pages).
- [32] C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria et J. R. Engelbrecht, « Crossover from BCS to Bose superconductivity : Transition temperature and time-dependent Ginzburg–Landau theory », *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993), p. 3202-3205.
- [33] L. Landau et E. Lifchitz, *Physique statistique – Première partie*, Éditions Mir, 1984.
- [34] H. B. Callen et T. A. Welton, « Irreversibility and Generalized Noise », *Phys. Rev.* **83** (1951), p. 34-40.

- [35] L. P. Lévy, *Magnétisme et supraconductivité*, InterÉditions; CNRS Éditions, 1997.
- [36] H. Kurkjian, J. Tempere et S. N. Klimin, « Linear response of a superfluid Fermi gas inside its pair-breaking continuum », *Sci. Rep.* **10** (2020), no. 1, article no. 11591 (22 pages).
- [37] Y. Castin, « Spectroscopie de Bragg et mode du continuum de paire brisée dans un gaz de fermions superfluide », *Comptes Rendus. Physique* **21** (2020), no. 3, p. 203-219. [Version anglaise : « Bragg spectroscopy and pair-breaking-continuum mode in a superfluid Fermi gas », hal-02377014 (2020), en ligne sur <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02377014>].
- [38] L. He, « Dynamic density and spin responses of a superfluid Fermi gas in the BCS–BEC crossover : Path integral formulation and pair fluctuation theory », *Ann. Phys.* **373** (2016), p. 470-511.
- [39] I. O. Kulik, O. Entin-Wohlman et R. Orbach, « Pair susceptibility and mode propagation in superconductors : A microscopic approach », *J. Low Temp. Phys.* **43** (1981), p. 591-620.
- [40] S. N. Klimin, J. Tempere et H. Kurkjian, « Phononic collective excitations in superfluid Fermi gases at nonzero temperatures », *Phys. Rev. A* **100** (2019), article no. 063634 (22 pages).
- [41] Y. Castin, « Questions ouvertes pour les gaz de fermions en interaction forte et de portée nulle/Open questions for strongly interacting Fermi gases with zero-range interactions », *Comptes Rendus. Physique* **26** (2025), p. 393-461.
- [42] J. Stenger, S. Inouye, A. P. Chikkatur, D. M. Stamper-Kurn, D. E. Pritchard et W. Ketterle, « Bragg Spectroscopy of a Bose–Einstein Condensate », *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999), p. 4569-4573.
- [43] S. N. Klimin, J. Tempere et H. Kurkjian, « Collective excitations of superfluid Fermi gases near the transition temperature », *Phys. Rev. A* **103** (2021), article no. 043336 (20 pages).
- [44] Y. Castin, I. Ferrier-Barbut et C. Salomon, « La vitesse critique de Landau d’une particule dans un superfluide de fermions », *Comptes Rendus. Physique* **16** (2015), no. 2, p. 241-253. [Version anglaise : « The Landau critical velocity for a particle in a Fermi superfluid », hal-01053706 v3 (2015), en ligne sur <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01053706>].
- [45] H. Kurkjian, Y. Castin et A. Sinatra, « Concavity of the collective excitation branch of a Fermi gas in the BEC-BCS crossover », *Phys. Rev. A* **93** (2016), article no. 013623 (7 pages). [Version française : « Concavité de la branche d’excitation collective d’un gaz de fermions dans la zone de raccordement CBE-BCS », hal-01228798 v2 (2016), en ligne sur <https://hal.science/hal-01228798>].
- [46] H. Hu, X.-J. Liu et P. D. Drummond, « Equation of state of a superfluid Fermi gas in the BCS-BEC crossover », *Europhys. Lett.* **74** (2006), no. 4, article no. 574.
- [47] A. L. Fetter et J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, Dover Publications, 2003.
- [48] M. Holzmann et Y. Castin, « Pair correlation function of an inhomogeneous interacting Bose–Einstein condensate », *Eur. Phys. J. D, Atomic Mol. Opt. Plasma Phys.* **7** (1999), no. 3, p. 425-432.
- [49] M. A. Escobedo et C. Manuel, « Effective field theory and dispersion law of the phonons of a nonrelativistic superfluid », *Phys. Rev. A* **82** (2010), article no. 023614 (11 pages).
- [50] Y. Castin, A. Serafin et A. Sinatra, « Amortissement des phonons dans un superfluide 2D : insuffisance de la règle d’or de Fermi à basse température », *Comptes Rendus. Physique* **24** (2023), no. S3, p. 187-239. [Version anglaise : « Phonon damping in a 2D superfluid : insufficiency of Fermi’s golden rule at low temperature », hal-04168815 v2 (2024), en ligne sur <https://hal.science/hal-04168815>].
- [51] L. Landau et I. Khalatnikov, « Teoriya vyzakosti Geliya-II », *Zh. Ehksper. Teor. Fiz.* **19** (1949), p. 637. [Version anglaise dans *Collected papers of L.D. Landau*, chapitre 69, p. 494, édité par D. ter Haar (Pergamon, New York, 1965)].
- [52] A. Schirotzek, Y. Shin, C. H. Schunck et W. Ketterle, « Determination of the Superfluid Gap in Atomic Fermi Gases by Quasiparticle Spectroscopy », *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008), article no. 140403 (4 pages).
- [53] M. J. H. Ku, A. T. Sommer, L. W. Cheuk et M. W. Zwierlein, « Revealing the Superfluid Lambda Transition in the Universal Thermodynamics of a Unitary Fermi Gas », *Science* **335** (2012), no. 6068, p. 563-567.
- [54] Z. Hadzibabic, S. Gupta, C. A. Stan, C. H. Schunck, M. W. Zwierlein, K. Dieckmann et W. Ketterle, « Fiftyfold Improvement in the Number of Quantum Degenerate Fermionic Atoms », *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003), article no. 160401 (4 pages).
- [55] Y. Nishida et D. T. Son, « ϵ Expansion for a Fermi Gas at Infinite Scattering Length », *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006), article no. 050403 (4 pages).
- [56] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras et S. Giorgini, « Equation of State of a Fermi Gas in the BEC-BCS Crossover : A Quantum Monte Carlo Study », *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004), article no. 200404 (4 pages).
- [57] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii et S. Stringari, « Theory of ultracold atomic Fermi gases », *Rev. Mod. Phys.* **80** (2008), p. 1215-1274.
- [58] C. Daix, M. Dixmerias, Y.-Y. He, J. Verstraten, T. de Jongh, B. Peaudecerf, S. Zhang et T. Yefsah, « Observing Spatial Charge and Spin Correlations in a Strongly-Interacting Fermi Gas », prépublication, 2025. En ligne sur <https://hal.science/hal-05046046>.
- [59] R. Yao, S. Chi, M. Wang, R. J. Fletcher et M. Zwierlein, « Measuring Pair Correlations in Bose and Fermi Gases via Atom-Resolved Microscopy », *Phys. Rev. Lett.* **134** (2025), article no. 183402 (7 pages).

- [60] M. F. Parsons, A. Mazurenko, C. S. Chiu, G. Ji, D. Greif et M. Greiner, « Site-resolved measurement of the spin-correlation function in the Fermi–Hubbard model », *Science* **353** (2016), no. 6305, p. 1253-1256.
- [61] L. W. Cheuk, M. A. Nichols, K. R. Lawrence et al., « Observation of spatial charge and spin correlations in the 2D Fermi–Hubbard model », *Science* **353** (2016), no. 6305, p. 1260-1264.
- [62] M. Boll, T. A. Hilker, G. Salomon, A. Omran, J. Nespolo, L. Pollet, I. Bloch et C. Gross, « Spin- and density-resolved microscopy of antiferromagnetic correlations in Fermi–Hubbard chains », *Science* **353** (2016), no. 6305, p. 1257-1260.
- [63] J. Verstraten, K. Dai, M. Dixmieras, B. Peaudecerf, T. de Jongh et T. Yefsah, « In Situ Imaging of a Single-Atom Wave Packet in Continuous Space », *Phys. Rev. Lett.* **134** (2025), article no. 083403 (7 pages).
- [64] J. Xiang, E. Cruz-Colón, C. C. Chua, W. R. Milner, J. de Hond, J. F. Fricke et W. Ketterle, « In Situ Imaging of the Thermal de Broglie Wavelength in an Ultracold Bose Gas », *Phys. Rev. Lett.* **134** (2025), article no. 183401 (6 pages).
- [65] G. Bertaina et S. Giorgini, « BCS-BEC Crossover in a Two-Dimensional Fermi Gas », *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011), article no. 110403 (4 pages).
- [66] H. Shi, S. Chiesa et S. Zhang, « Ground-state properties of strongly interacting Fermi gases in two dimensions », *Phys. Rev. A* **92** (2015), article no. 033603 (7 pages).
- [67] I. Boettcher, L. Bayha, D. Kedar et al., « Equation of State of Ultracold Fermions in the 2D BEC-BCS Crossover Region », *Phys. Rev. Lett.* **116** (2016), article no. 045303 (5 pages).
- [68] F. Werner et Y. Castin, « General relations for quantum gases in two and three dimensions : Two-component fermions », *Phys. Rev. A* **86** (2012), article no. 013626 (38 pages).
- [69] M. Olshanii et V. Dunjko, « Short-Distance Correlation Properties of the Lieb–Liniger System and Momentum Distributions of Trapped One-Dimensional Atomic Gases », *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003), article no. 090401 (4 pages).
- [70] S. Tan, « Large momentum part of a strongly correlated Fermi gas », *Ann. Phys.* **323** (2008), no. 12, p. 2971-2986.
- [71] F. Werner et Y. Castin, « General relations for quantum gases in two and three dimensions : Two-component fermions ». En ligne sur <https://hal.science/hal-00687524v3>. Version augmentée de [68].
- [72] F. Werner, L. Tarruell et Y. Castin, « Number of closed-channel molecules in the BEC-BCS crossover », *Eur. Phys. J. B, Condens. Matter Complex Syst.* **68** (2009), no. 3, p. 401-415.
- [73] F. Palestini et G. C. Strinati, « Temperature dependence of the pair coherence and healing lengths for a fermionic superfluid throughout the BCS-BEC crossover », *Phys. Rev. B* **89** (2014), article no. 224508 (20 pages).
- [74] N. Kaschewski, A. Pelster et C. A. R. Sá de Melo, « Equal-spin and opposite-spin density-density correlations in the BCS-BEC crossover : Gauge Symmetry, Pauli Exclusion Principle, Wick's Theorem and Experiments », prépublication, 2026. En ligne sur <https://arxiv.org/abs/2602.23019v1>.
- [75] L. Pitaevskii et S. Stringari, *Bose–Einstein Condensation and Superfluidity*, Oxford University Press, 2016.
- [76] J. S. Bell, « Fluctuation Compressibility Theorem and Its Application to the Pairing Model », *Phys. Rev.* **129** (1963), p. 1896-1900.