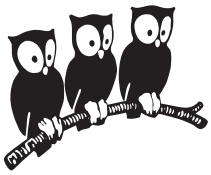
ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE
Département de Physique
Laboratoire de Physique Statistique



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

Présentée par

Maguelonne Chevallier

pour obtenir le titre de Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie

Bosons à basse température : des intégrales de chemin aux gaz quasi-bidimensionnels.

Soutenue le 15 septembre 2009 devant le jury composé de :

Isabelle Bouchoule	Examinateur
Claude Aslangul	Examinateur
Werner Krauth	Directeur de thèse
Zoran Hadzibabic	Rapporteur
Thierry Jolicoeur	Rapporteur
Philippe Lecheminant	Examinateur

Remerciements

Ces trois années de thèse passées au Laboratoire de Physique Statistique de l'Ecole Normale Supérieure ont été riches en rencontres et en discussions. Je remercie le laboratoire de m'avoir accueillie.

Je remercie Werner Krauth, mon directeur de thèse, de m'avoir guidée pendant tout ce temps. Grâce à son enthousiasme débordant, j'ai pu percevoir certains côtés merveilleux de la physique. Sa patience et sa motivation m'ont poussée lorsque mes ressources commençaient à faire défaut, et son petit livre bleu m'a sauvée de bien des erreurs par sa clarté. Je remercie également Markus Holzmann, avec qui nous avons collaboré pendant ma thèse. Ma compréhension des gaz de Bose doit beaucoup à ses travaux et à ses explications.

Merci à Isabelle Bouchoule, Claude Aslangul, Thierry Jolicoeur, Philippe Lecheminant et Zoran Hadzibabic d'avoir accepté de constituer mon jury de thèse, et d'avoir contribué à l'amélioration de mon manuscrit par leurs remarques. Merci à Eric Brunet d'avoir accepté de relire mon manuscrit.

Je remercie également le secrétariat du LPS, et le service informatique pour leur aide précieuse et patiente.

Merci à Werner, Cédric, Etienne, Raoul et Alberto pour les cafés, Guang Ming et autres discussions qui ont apporté de la chaleur à nos journées de travail. Merci à Samuel et Andi ainsi que leur équipe de m'avoir si souvent accueillie à leur table, et à tous ceux avec qui j'ai pu partager quelques pauses cafés conviviales !

Je remercie les ports de Paris, Villeneuve Triage, et d'autres plus maritimes (dont j'omettrai les noms car ils sortent du cadre strict de l'élaboration de cette thèse) pour leur accueil, ainsi que mon fier et tendre navire Bleu Marine, qui m'a permis de flotter au milieu de rencontres improbables et surprenantes durant ces trois années. Ma reconnaissance envers Neptune et Jules Verne, d'avoir été là aux bons moments, et envers Atalante, Dox et Tildou, d'avoir été toujours là, est éternelle ! Je remercie spécialement Dox pour ses histoires des temps anciens et son accueil infaillible après certaines longues journées de physique théorique et solitaire.

Mes amis « terrestres »m'ont aussi aidée dans cette thèse, par leur présence, et par l'incrédulité de leur regard dubitatif qui m'a poussée à aller au bout de ce travail.

Enfin, je remercie ma famille, qui par son ancrage solide bordelais m'a permis de garder

le minimum de pragmatisme nécessaire à ma survie dans mon monde soudainement envahi par la physique théorique. Remerciements particuliers à Clémence, Félix et Casimir pour leur relecture attentive de mon manuscrit, et à mes parents qui par leur confiance et leur tendre soutien m'aident à aller au bout de mes projets.

Introduction générale

En 1924, Satyendra Nath Bose, jeune physicien bengali envoie un projet d'article à Albert Einstein. Dans cet article il montre que les photons ne se comportent pas de manière statistiquement indépendante, mais qu'ils manifestent une certaine tendance au grégarisme. La présence d'un photon dans un état quantique donné augmente la probabilité de trouver un autre photon dans ce même état quantique. Après avoir veillé à la publication de cet article, Einstein généralisa cette statistique, nommée désormais statistique de Bose-Einstein, à un gaz de particules matérielles [1], [2].

Il découvre ainsi la possibilité d'une étrange transition de phase dans un gaz de Bose idéal (c'est-à-dire sans interaction) : à basse température, les bosons s'accumulent dans l'état fondamental de la boîte confinant les particules. Ce phénomène, appelé condensation de Bose-Einstein se produit lorsque les fonctions d'onde des bosons sont suffisamment étendues pour se recouvrir entre elles. À très basse température, on obtient un objet représenté par une seule fonction d'onde, caractérisé par des propriétés de cohérence. La condensation de Bose-Einstein est une des rares manifestations macroscopiques de la physique quantique. Depuis 1995, des condensats de Bose-Einstein sont réalisés dans les laboratoires, dans des gaz d'atomes alcalins refroidis par laser (Rubidium [3], Sodium [4], Lithium [5]).

À basse température, suivant la géométrie considérée et la nature des interactions, les gaz de Bose peuvent aussi connaître une transition superfluide. Ma thèse présente quelques résultats sur ces phénomènes quantiques.

Au cours de ma thèse, réalisée entre septembre 2006 et septembre 2009 sous la direction de Werner Krauth, au Laboratoire de Physique Statistique de l'Ecole Normale Supérieure, nous nous sommes intéressés au gaz de Bose à basse température, dans différentes géométries. Ce manuscrit présente le travail réalisé durant mes trois années de thèse, en collaboration avec Werner Krauth et Markus Holzmann. Il est composé de deux parties. La première partie concerne des aspects mathématiques du gaz de Bose. Nous avons étudié le lien entre la condensation de Bose-Einstein et le groupe des permutations, plus précisément la distribution des longueurs des cycles dans les permutations. La deuxième partie de ma thèse est plus concrète, puisque nous nous sommes intéressés au gaz de Bose dans un piège quasi-bidimensionnel, en lien avec l'actualité des expériences dans ce domaine.

La première partie présente notre étude des relations entre la condensation de Bose-Einstein, l'apparition de cycles de longueur infinie dans les permutations, et la superfluidité. Le groupe des permutations a une importance cruciale dans la description mathématique de la condensation de Bose-Einstein, car le vecteur d'état d'un système de N bosons identiques est totalement symétrique par rapport à l'échange de deux quelconques de ces particules. Une permutation peut être factorisée en un produit de cycles. La représentation en intégrale de chemin de la fonction de partition bosonique fait apparaître la structure en cycles des permutations. La condensation de Bose-Einstein est liée à l'apparition de cycles de longueur infinie dans les permutations. L'étude de la relation entre la longueur des cycles et la condensation de Bose-Einstein pour des gaz de Bose sans interaction fait l'objet de la première partie de ma thèse. L'idée initiale était de généraliser cette relation aux systèmes en interaction, et de donner un théorème sur l'équivalence entre la condensation de Bose-Einstein et l'apparition de cycles de longueur infinie. Bien que ce théorème reste à l'état de conjecture pour les systèmes en interaction, nous l'avons démontré de manière simple et explicite pour les gaz idéaux. Grâce à ce travail, nous avons acquis une vision claire du gaz de Bose idéal, dans différentes géométries.

Le travail de la première partie a trouvé une utilité pratique lorsque nous nous sommes intéressés aux expériences de bosons froids dans des pièges quasi-bidimensionnels. En effet l'approche de ce système en terme de longueurs de cycles nous a permis de comprendre l'importance de la troisième dimension dans les nuages atomiques. Nous avons développé un modèle pour le gaz piégé quasi-bidimensionnel qui tient compte de l'excitation thermique résiduelle des atomes selon la direction de fort confinement du piège. Les prédictions de ce modèle, dans lequel nous prenons en compte les interactions par une théorie de champ moyen sont conformes aux résultats de l'expérience [6], [7] et des simulations numériques [8].

Table des matières

I Condensation de Bose-Einstein, superfluidité et cycles longs 9

1 Formulation en intégrale de chemin du gaz de Bose 13
1.1 Gaz de Bose et groupe des permutations 13
1.2 Intérêt de la description du gaz de Bose en intégrale de chemin 20
1.3 Présentation du travail réalisé 24

2 Gaz de Bose idéal et statistique des longueurs de cycles 27
2.1 Fonction de partition et distribution des longueurs de cycle. 27
2.2 Formule de la dérivée discrète. 30
2.3 Matrice densité réduite à une particule pour le gaz idéal 32

3 Condensation de Bose-Einstein et cycles infinis 35
3.1 Gaz idéal homogène tridimensionnel 35
3.2 Gaz idéal dans un piège harmonique de dimension $d > 1$ 41
3.3 Longueur moyenne des cycles et fraction condensée 44
3.4 Cycles infinis sans condensat ? 48
3.5 Conclusion 51

4 Superfluidité et cycles infinis 53
4.1 Superfluidité et cycles longs pour le gaz homogène tridimensionnel 53
4.2 Gaz homogène bidimensionnel 55

II Gaz de Bose dans un piège quasi-bidimensionnel 63

5 Gaz de Bose bidimensionnel : contexte expérimental 67
5.1 La théorie des gaz bidimensionnels piégés 67
5.2 Les expériences en deux dimensions 68
5.3 Questions soulevées par les expériences 71

6 Gaz idéal piégé quasi-bidimensionnel **73**
6.1 Définition du piège quasi-bidimensionnel 73
6.2 Distribution des longueurs des cycles 75
6.3 Température de transition de Bose–Einstein 76
6.4 Profil de densité 81
6.5 Conclusion 84

7 Gaz piégé quasi-bidimensionnel avec interactions **85**
7.1 Les approximations 85
7.2 Calcul du profil de densité 88
7.3 Absence de condensation de Bose–Einstein 94
7.4 Calcul de la température de transition superfluide 95
7.5 Conclusion 96

8 Annexes **99**
8.1 Démonstration du lemme Eq. (3.29) 99
8.2 Variance de la variable aléatoire N_{exc} en présence de condensat 101
8.3 Equivalence entre condensation de Bose-Einstein et existence de cycles infinis, pour le gaz de Bose idéal piégé quasi-bidimensionnel 102
8.4 Calcul de la fugacité du gaz idéal homogène bidimensionnel 103

9 Publications **107**

Première partie

Condensation de Bose-Einstein, superfluidité et cycles longs

Introduction

La condensation de Bose-Einstein est une manifestation macroscopique de la physique quantique. Elle est une conséquence de l'indiscernabilité des particules identiques, à basse température. En effet, lorsque la longueur de de Broglie thermique associée à chaque particule est de l'ordre de la distance entre les particules, les fonctions d'onde se recouvrent et on ne peut plus distinguer deux particules. Les effets de la statistique bosonique, qui est caractérisée par l'invariance de la fonction d'onde par permutation des bosons, sont alors visibles.

Le formalisme de l'intégrale de chemin a été introduit par Feynman. Pour des systèmes de bosons identiques, ce formalisme fait intervenir de manière explicite les permutations. Il est alors possible de définir une mesure sur le groupe des permutations, à partir de la fonction de partition du gaz de Bose.

Cette mesure permet de définir l'espérance de certaines variables aléatoires. Nous nous sommes intéressés en particulier à la longueur moyenne des cycles dans les permutations. La mesure dépend de la température du gaz auquel elle est associée. Ainsi, la longueur moyenne des cycles dans les permutations dépend de la température du gaz. Il y a donc une relation entre la condensation de Bose-Einstein, phénomène qui apparaît à basse température, et la longueur des cycles dans les permutations. L'étude de cette relation fait l'objet de la première partie de ma thèse.

Cette première partie présente d'abord le formalisme de l'intégrale de chemin pour le gaz de Bose, puis expose quelques résultats généraux concernant les systèmes de bosons sans interaction et la statistique des longueurs de cycles dans les permutations. Apparaît ensuite la démonstration d'un théorème qui donne l'égalité, à la limite thermodynamique, de la fraction condensée et du poids statistique des cycles de longueur infinie. Enfin, l'étude de la superfluidité en terme de longueur des cycles est présentée.

1

Formulation en intégrale de chemin du gaz de Bose

Après avoir présenté le formalisme de l'intégrale de chemin, qui permet d'associer l'étude d'un gaz de Bose à une mesure sur le groupe des permutations, ce chapitre explique pourquoi l'intégrale de chemin apporte un éclairage intéressant sur le gaz de Bose, notamment pour comprendre le gaz en interaction. Enfin j'expose brièvement les résultats de ma thèse, détaillés dans la suite.

1.1 Gaz de Bose et groupe des permutations

La fonction de partition donne accès aux propriétés thermodynamiques du système. Feynman a proposé en 1953 un calcul de la fonction de partition d'un gaz de Bose sous forme d'intégrale de chemin [9]. Sa méthode permet de calculer la fonction de partition bosonique à partir de la matrice densité pour des particules discernables.

1.1.1 Fonction de partition du gaz de Boltzmann

On appelle gaz de Boltzmann un gaz de particules identiques discernables. Elles obéissent à la statistique de Boltzmann, c'est-à-dire que le nombre d'occupation d'un niveau d'énergie E est $e^{-\beta E}$, où β désigne l'inverse de la température ($\beta = 1/(k_B T)$).

L'opérateur densité $\hat{\rho}$ s'écrit

$$\hat{\rho} = e^{-\beta \hat{H}}, \tag{1.1}$$

où $\hat{H}$ désigne le Hamiltonien du système. L'opérateur densité donne accès à la valeur moyenne d'une observable quelconque O par la formule suivante :

$$\langle O \rangle = tr(\hat{O}\hat{\rho})/tr(\hat{\rho}),$$

où tr désigne la trace. L'expression traditionnelle de la matrice densité nécessite d'avoir diagonalisé le Hamiltonien du système, c'est-à-dire de connaître son spectre d'énergies propres E_n et les fonctions propres correspondantes ψ_n :

$$\hat{\rho} = \sum_{\text{états propres}} e^{-\beta E_n} |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \quad \text{ou} \quad \rho(X, X', \beta) = \sum_{\text{états propres}} e^{-\beta E_n} \psi_n(X)\psi_n^*(X').$$

$\rho(X, X', \beta)$ est un coefficient non diagonal de la matrice densité, entre les configurations X et X'. Une configuration est un vecteur à N composantes de R^D, où D est la dimension de l'espace : $X = (x_1, ..., x_N)$ avec $x_i \in R^D$.

En représentation position, la matrice densité sous forme d'intégrale de chemin s'écrit comme une somme, sur tous les chemins possibles allant d'une configuration à une autre, de la probabilité de la réalisation de ce chemin. Cette expression ne nécessite pas la diagonalisation du hamiltonien et se prête bien aux calculs numériques.

Pour un système de N particules identiques obéissant à la statistique de Boltzmann, la matrice densité s'écrit :

$$\rho^{\text{dis}}(X, X', \beta) = \int_{tr} \Phi[(x_1(u), ..., x_N(u))] D^N x_i(u).$$

La trace $\int_{tr}$ est prise sur toutes les trajectoires $x_i(u)$ qui commencent en $x_i(0) = x_i$ et qui terminent en $x_i(\hbar\beta) = x_i'$. La quantité $\Phi[(x_1(u), ..., x_N(u))]$ est l'amplitude de probabilité du chemin considéré. Pour un système de particules soumises au potentiel d'interaction V, elle s'exprime :

$$\Phi[(x_1(u), ..., x_N(u))] = \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} [\frac{m}{2}(\frac{dx}{du})^2 + V(x(u), u)] du\right).$$

La fonction de partition est la trace de la matrice densité. La trace est indépendante de la base choisie. Si on exprime la matrice densité dans la base des positions, la trace est obtenue en intégrant sur tout l'espace le coefficient diagonal de la matrice densité :

$$Z_N^{\text{dis}} = \int d^N x_i \int_{tr} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} [\frac{m}{2}(\frac{dx}{du})^2 + V(x(u), u)] du\right) D^N x_i(u).$$

Ici $(x_1, x_2, ..., x_i, ..., x_N)$ désigne toutes les configurations possibles pour les N particules dans l'espace. La trace $\int_{tr}$ doit être faite sur toutes les trajectoires $x_i(u)$ qui commencent en x_i ($x_i(0) = x_i$), et qui terminent également en x_i ($x_i(\beta) = x_i$).

Connaissant les énergies propres E_n du système, la fonction de partition s'écrit simplement :

$$Z^{\text{dis}} = \sum_{\text{états propres}} e^{-\beta E_n}.$$

Bien que cette expression de la fonction de partition soit simple, calculer les énergies propres peut être un travail fastidieux, et on préfèrera souvent dans les simulations numériques la formulation en intégrale de chemin.

Temps imaginaire

Dans l'expression $e^{-\beta\hat{H}}$ de la matrice densité, la température inverse β est aussi appelée "temps imaginaire". Ceci vient de l'analogie formelle entre l'opérateur densité $\hat{\rho}$, et l'opérateur d'évolution $\hat{U}$ dans la représentation d'Heisenberg de la mécanique quantique. L'opérateur d'évolution s'écrit $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, et l'opérateur densité peut être interprété comme l'opérateur d'évolution au "temps imaginaire" $it = \hbar\beta$.

Dans la représentation d'Heisenberg, $\langle\psi|e^{-it\hat{H}/\hbar}|\psi'\rangle$ est l'amplitude de probabilité que le système physique régi par le Hamiltonien $\hat{H}$ passe de l'état $|\psi\rangle$ à l'état $|\psi'\rangle$ pendant le

temps t. De la même manière, on interprète le coefficient $\langle\psi|\hat{\rho}|\psi'\rangle$ de la matrice densité comme l'amplitude de probabilité de passer de l'état $|\psi\rangle$ à l'état $|\psi'\rangle$ pendant le temps imaginaire $\hbar\beta$. Souvent, on pose $\hbar = 1$, et le temps imaginaire est alors simplement la température inverse β.

1.1.2 Fonction de partition du gaz de Bose

La caractéristique principale d'un système de N bosons identiques est que la fonction d'onde est invariante par permutation des bosons. Les états propres bosoniques sont donc des états symétriques. La matrice densité est semblable à celle du gaz de Boltzmann, mais en restreignant la somme aux états propres symétriques à N particules.

$$\rho^{\text{bos}}(X, X', \beta) = \sum_{\text{états propres symétriques}} e^{-\beta E_n} \psi_n(X) \psi_n^*(X').$$

On définit l'opérateur symétriseur $\hat{S}$ par :

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S(N)} \hat{P},$$

où $S(N)$ désigne le groupe des permutations, et P un élément quelconque de ce groupe. A toute permutation P on associe l'opérateur permutation $\hat{P}$, défini par :

$$\forall |X\rangle = |x_1, ..., x_N\rangle, \quad \text{on a} \quad \langle X|(P|\psi\rangle) = \psi(x_{P(1)}, ..., x_{P(N)}).$$

L'opérateur densité bosonique $\hat{\rho}^{\text{bos}}$ s'exprime alors à l'aide de l'opérateur densité de Boltzmann $\hat{\rho}^{\text{dis}}$ et de l'opérateur symétriseur $\hat{S}$ par :

$$\rho^{\text{bos}}(X, X', \beta) = \langle X|\hat{S} e^{-\beta \hat{H}} \hat{S}|X'\rangle, \quad \text{c'est-à-dire} \quad \hat{\rho}^{\text{bos}} = \hat{S}\hat{\rho}^{\text{dis}}\hat{S}.$$

Pour un système de particules identiques, le Hamiltonien est invariant par permutation des particules, donc il commute avec tout opérateur permutation $\hat{P}$, et donc aussi avec l'opérateur symétriseur $\hat{S}$. Alors $\hat{\rho}^{\text{bos}} = \hat{S}\hat{\rho}^{\text{dis}}\hat{S} = \hat{\rho}^{\text{bos}}\hat{S}^2$. Le symétriseur est un projecteur, donc $\hat{S}^2 = \hat{S}$, une seule application du symétriseur suffit. C'est pourquoi : $\hat{\rho}^{\text{bos}} = \hat{\rho}^{\text{dis}}\hat{S}$. Par conséquent la matrice densité bosonique s'exprime en fonction de la matrice densité pour des particules discernables [10] :

$$\rho^{\text{bos}}(X, X', \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S(N)} \rho^{\text{dis}}(X, PX', \beta). \tag{1.2}$$

Sous forme d'intégrale de chemin la matrice densité bosonique s'écrit donc :

$$\rho^{\text{bos}}(X, X', \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S(N)} \int_{tr_P} \Phi[(x_1(u), ..., x_N(u))] D^N x_i(u).$$

Désormais, la trace $\int_{tr_P}$ est calculée sur toutes les trajectoires qui commencent en X (c'est-à-dire $\forall i \quad x_i(0) = x_i$) et qui terminent en PX' (c'est-à-dire $\forall i \quad x_i(\beta) = x'_{P(i)}$), où P désigne une permutation des N particules.

Enfin,la fonction de partition bosonique est obtenue en calculant la trace de la matrice densité :

$$Z_N^{\text{bos}} = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S(N)} \int d^N z_i \int_{tr_P} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} [\frac{m}{2}(\frac{dx}{du})^2 + V(x(u), u)] du \right) D^N x_i(u).$$

En fonction de la matrice densité du gaz de Boltzmann, la fonction de partition bosonique est :

$$Z_N^{\text{bos}} = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S(N)} \int d^N z_i \rho^{\text{dis}}(z_1, ..., z_N; z_{P(1)}, ..., z_{P(N)}; \beta) \tag{1.3}$$

Les coefficients non-diagonaux de la matrice densité des particules discernables interviennent donc dans le calcul de la fonction de partition bosonique.

Pour des particules obéissant à la statistique de Boltzmann, seuls les chemins qui ont les mêmes configurations de départ et d'arrivée contribuent à la fonction de partition (Fig. 1.1).

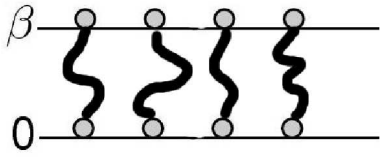


FIG. 1.1 – Trajectoires en temps imaginaire pour des particules discernables. Seuls les chemins qui relient la même configuration au départ et à l'arrivée interviennent dans le calcul de la fonction de partition d'un système de particules identiques discernables. Le schéma montre un chemin possible entre deux configurations identiques pour 4 particules, entre le temps imaginaire 0 et le temps imaginaire β, pour un système de dimension 1.

En revanche pour des bosons, des chemins qui vont d'une configuration de départ à une configuration d'arrivée pour laquelle les positions sont permutées les unes avec les autres contribuent à la fonction de partition (Fig. 1.2).

1.1.3 Température de dégénérescence du gaz de Bose

La différence entre un gaz de Bose et un gaz de Boltzmann apparaît à basse température, lorsque les gaz sont dégénérés. Le formalisme des intégrales de chemin permet de déterminer à quelle température la dégénérescence apparaît.

Dans le calcul de la fonction de partition bosonique, les coefficients non diagonaux de la matrice densité du gaz de Boltzmann interviennent (Eq. (1.3)). Or, pour un gaz de Boltzmann sans interaction, la matrice densité à N particules se factorise en produit des matrices densités pour une seule particule. La matrice densité d'une particule libre, dans l'espace de dimension D, à température inverse β est, en représentation position [10] :

$$\rho_1^{\text{libre}}(x, x', \beta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{D/2} \exp\left(-\frac{m|x-x'|^2}{2\hbar^2\beta} \right) \quad \text{et} \quad \lim_{\beta \to 0} \rho_1^{\text{libre}}(x, x', \beta) = \delta^D(x - x'). \tag{1.4}$$

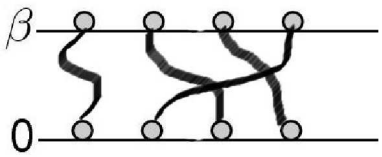


FIG. 1.2 – Exemple de chemin dont on doit tenir compte pour le calcul de la fonction de partition bosonique. Ici, entre le temps imaginaire 0 et le temps imaginaire β trois bosons ont permuté leurs positions. Le calcul de la fonction de partition nécessite l'évaluation du poids statistique de ce chemin pour le système physique en question, avec ou sans interaction, à la température inverse β.

Ceci signifie que pour les particules libres, une trajectoire dans le temps imaginaire β est un mouvement brownien. Donc la valeur moyenne de la position est nulle, et sa variance est proportionnelle au temps (imaginaire) de parcours : $\langle x^2 \rangle \sim 2\pi\beta\hbar^2/m = \lambda^2$. La variance de la position en fonction du temps imaginaire est donnée par le carré de la longueur de de Broglie λ^2.

Si la température du gaz est élevée, β est petit, donc la variance de la position en temps imaginaire est faible. Les chemins probables sont alors ceux dont les points de départ et d'arrivée sont très proches. C'est pourquoi dans l'Eq. (1.3), les coefficients $\rho^{\mathrm{dis}}(X, PX, \beta)$, avec P permutation différente de l'identité, sont très petits. La fonction de partition bosonique est alors principalement déterminée par la contribution de la permutation identité, donc elle diffère peu de la fonction de partition du gaz de Boltzmann. A haute température, les propriétés thermodynamiques d'un système bosonique et d'un système de particules discernables sont donc identiques (voir Fig. 1.3-a').

En revanche à basse température, la longueur de de Broglie thermique augmente. Dès que la longueur de de Broglie devient de l'ordre de la distance moyenne d entre deux particules du gaz, les permutations qui échangent deux particules voisines donnent une contribution non nulle dans la fonction de partition dans Eq. (1.3). A basse température, les termes correspondants à des permutations différentes de l'identité prennent de l'importance dans la fonction de partition bosonique, c'est pourquoi le comportement du gaz de Bose diffère de celui du gaz de Boltzmann (voir Fig. 1.3-b').

La température de dégénérescence du gaz est la température pour laquelle la distance entre particules est de l'ordre de la longueur de de Broglie. Par exemple en trois dimensions, avec η la densité volumique, la distance moyenne entre deux particules est $d \sim \eta^{-1/3}$. La température de dégénérescence est atteinte pour $d \sim \lambda$, c'est-à-dire $\eta^{-1/3} \sim \sqrt{2\pi\beta\hbar^2/m}$, donc $k_B T_{\mathrm{dégé}} \sim 2\pi\eta^{2/3}\hbar^2/m$. La température de dégénérescence est la température à partir de laquelle les permutations autres que l'identité acquièrent un poids statistique non négligeable dans la fonction de partition bosonique.

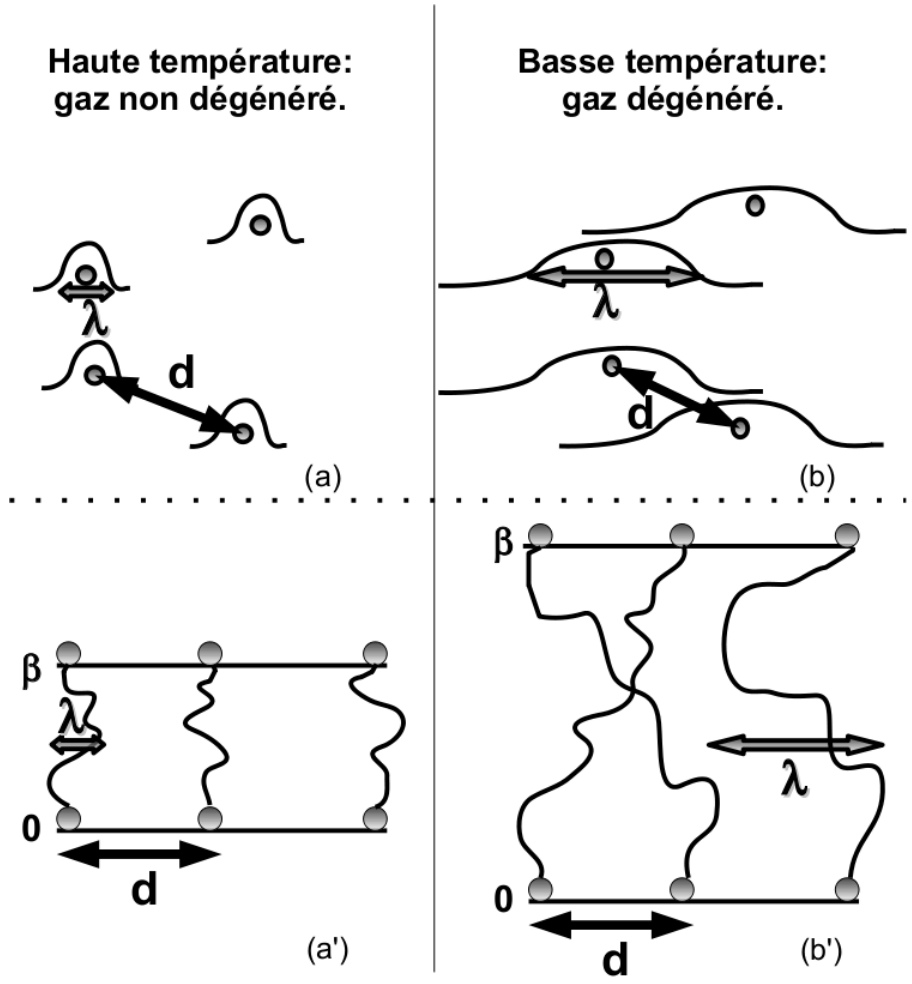


FIG. 1.3 – Dégénérescence d'un gaz de Bose. Les schémas du haut (a) et (b) représentent chaque boson par un point, au dessus-duquel se trouve l'allure du coefficient non diagonal de la matrice densité en représentation position. Ce coefficient caractérise les corrélations entre deux positions, c'est-à-dire la probabilité d'observer la particule à la fois en x et en x'. Pour une particule libre, il s'agit d'une gaussienne, et la variance de cette gaussienne est la longueur de de Broglie thermique de la particule. À haute température les bosons sont localisés car la longueur de de Broglie λ, qui caractérise l'étalement de leurs fonctions d'onde, est petite. En revanche à basse température la longueur de de Broglie augmente. Le gaz est dégénéré lorsque la longueur de de Broglie est de l'ordre de la distance d entre particules. Les schémas du bas (a') et (b') traduisent cette notion de dégénérescence en terme d'intégrale de chemin. À haute température, seuls les chemins de type (a'), qui ne permutent pas les positions des bosons sont probables. Il n'y a donc pas de différence entre un gaz de Bose et un gaz de Boltzmann. En revanche si on baisse la température les chemins de type (b'), qui mettent en jeu les permutations ont un poids statistique important dans la fonction de partition bosonique. Comme ce type de chemins n'apparaît pas dans la fonction de partition du gaz de Boltzmann, la différence entre les bosons et les particules discernables s'accroît en-dessous de la température de dégénérescence.

1.1.4 Distribution de probabilité des longueurs de cycles

La différence à basse température entre le gaz de Bose et le gaz de Boltzmann s'explique par le fait que les permutations interviennent dans la fonction de partition bosonique, mais pas dans la fonction de partition des particules discernables.

Pour un gaz de Bose, la fonction de partition s'écrit comme une somme sur les permutations d'un terme qui dépend de la permutation en question :

$$Z_N^{\text{bos}} = \sum_{P \in S(N)} Z_P \quad \text{d'où} \quad \pi_P = \frac{Z_P}{Z_N}.$$

π_P désigne la probabilité de la permutation P. Ainsi, l'étude d'un système bosonique revient à introduire une mesure sur le groupe des permutations. Suivant la température du gaz, la géométrie du système, la présence ou non d'interactions, cette mesure varie.

Dans le cadre de l'étude de la condensation de Bose–Einstein, la caractéristique significative des permutations est la longueur des cycles qu'elles contiennent. Les permutations se factorisent comme des produits de cycles à support disjoints, comme décrit sur l'exemple de la figure Fig. 1.4.

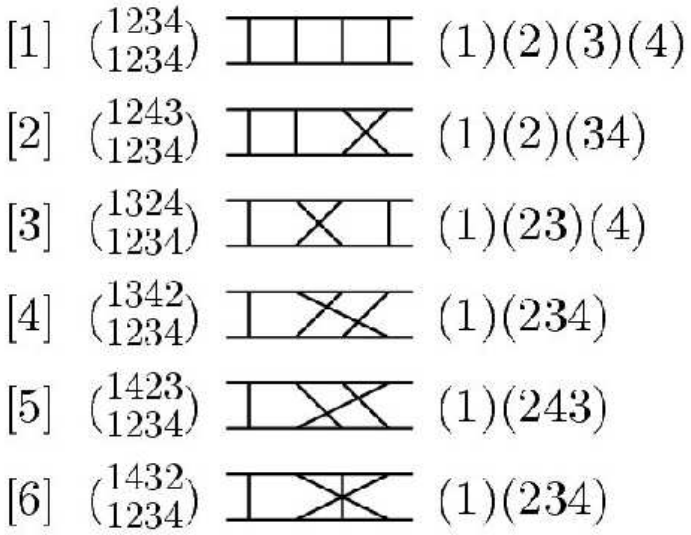


FIG. 1.4 – Quelques exemples de décomposition d'une permutation en produits de cycles à supports disjoints, d'après [11].

L'idée principale de cette première partie est que la fraction condensée est donnée par la contribution à la fonction de partition des cycles longs, dans la formulation en intégrale de chemin [9]. La démonstration de ce résultat nécessite la définition de la distribution de probabilité des longueurs de cycles.

La probabilité qu'une particule donnée appartienne à un cycle de taille k est donnée par :

$$\pi_k = \frac{1}{Z_N} \sum_{P \in (N,k)} Z_P, \tag{1.5}$$

avec (N,k) l'ensemble des permutations de $S(N)$ pour lesquelles la particule 1 appartient à un cycle de longueur k. Cette formule définit une mesure pour la variable aléatoire « longueur des cycles ». Dans le cas général, l'expression de π_k n'est pas simple. En revanche, il existe une formule récursive permettant de calculer exactement cette distribution pour un système sans interaction.

1.2 Intérêt de la description du gaz de Bose en intégrale de chemin

La description du gaz de Bose en intégrale de chemin fournit un lien vers les mathématiques, elle donne une description accessible du gaz en interaction, et elle est proche de la description de la superfluidité en terme d'indice d'enroulement (Section 1.2.5).

1.2.1 Lien avec les mathématiques

L'étude du gaz de Bose sous forme d'intégrale de chemin revient à introduire une mesure dans le groupe des permutations. Dans le domaine de l'analyse combinatoire, les mathématiciens s'intéressent à la distribution de variables aléatoires comme la longueur des cycles dans les permutations. Par exemple, Goncharov a étudié en 1943 [12] la distribution des longueurs de cycle pour la mesure uniforme sur le groupe des permutations. Ceci correspond au gaz de Bose à température nulle : toutes les permutations sont équiprobables. Plus tard, d'autres mathématiciens ont calculé la distribution du $n$ième cycle le plus long [13].

Ces problèmes d'analyse combinatoire, ainsi que des problèmes de percolation sur réseau rejoignent la description de Feynman du gaz de Bose.

La formulation en intégrale de chemin facilite la compréhension de la condensation de Bose–Einstein, en particulier pour les systèmes en interaction, par rapport à la description historique du phénomène, en terme de nombre d'occupation.

1.2.2 Description du gaz de Bose en terme de nombre d'occupation

La description traditionnelle de la condensation de Bose–Einstein [2] consiste à calculer le nombre d'occupation de chacun des niveaux d'énergie à une particule. Pour des bosons, le nombre d'occupation de l'état stationnaire à une particule σ, d'énergie ϵ_σ, est $N_\sigma = 1/(e^{\beta(\epsilon_\sigma-\mu)}-1)$, où $\mu < 0$ désigne le potentiel chimique. Le potentiel chimique est déterminé par la relation

$$\sum_\sigma N_\sigma = \sum_\sigma (e^{\beta(\epsilon_\sigma-\mu)}-1)^{-1} = N, \tag{1.6}$$

où N désigne le nombre total de bosons. Lorsque la température diminue, le potentiel chimique tend vers zéro. La limite $\mu \to 0$ dans la formule Eq. (1.6) détermine le nombre de saturation N_{sat} :

$$N_{\text{sat}} = \lim_{\mu\to 0} \sum_\epsilon (e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1)^{-1}.$$

À la limite thermodynamique, les niveaux d'énergie sont infiniment proches les uns des autres. Dans ce cas, le nombre de saturation s'exprime comme une intégrale sur l'énergie ϵ :

$$N_{\text{sat}} = \lim_{\mu \to 0} \sum_{\epsilon} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} = \int A_D \frac{D(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1}. \tag{1.7}$$

La constante A_D dépend de la dimension du système, et la quantité $D(\epsilon)$ est la densité d'état. Elle dépend de la géométrie et de la dimension du système considéré. Suivant l'expression de la densité d'état, le nombre de saturation peut être une quantité finie. Si N_{sat} est fini, il est alors possible que le nombre N de particules dans le système dépasse le nombre de saturation N_{sat}. Alors l'état fondamental (d'énergie $\epsilon = 0$) est macroscopiquement occupé, et son nombre d'occupation vaut $N_0 = N - N_{\text{sat}}$. On dit qu'il y a condensat si le nombre d'occupation d'un (ou plusieurs) niveau est macroscopique, c'est-à-dire proportionnel au nombre de bosons dans le système à la limite thermodynamique. Les particules qui ne sont pas dans l'état fondamental sont dans les états excités. Leur nombre est noté N_{exc}. Cette description est adaptée au gaz sans interaction (Fig. 1.5).

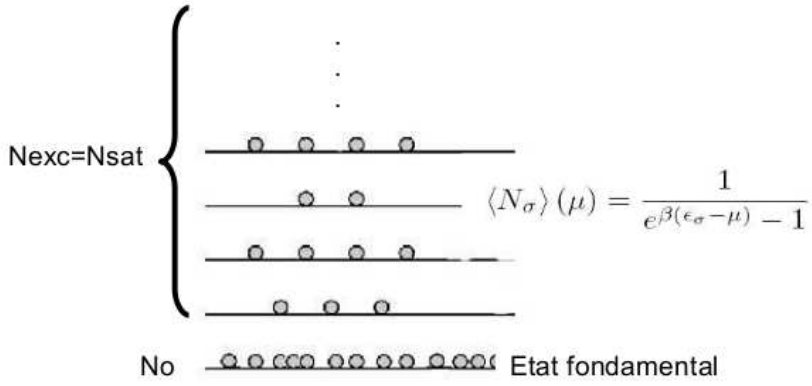


FIG. 1.5 – Répresentation du gaz idéal en terme de nombre d'occupation des états propres pour une seule particule. N_{sat} défini par Eq. (1.7) est le nombre de saturation. En présence d'un condensat de Bose-Einstein, N_{exc} bosons occupent des états excités, et $N_{\text{exc}} = N_{\text{sat}}$. Les N_0 autres bosons occupent le fondamental : $N_0 = N - N_{\text{sat}}$.

Cependant en présence d'interactions, les bosons de l'éventuel condensat ne condensent pas forcément dans un état propre du hamiltonien à une particule. En effet, pour un gaz en interaction, le Hamiltonien ne s'exprime plus comme la somme de Hamiltoniens à une particule qui commutent entre eux, et donc les fonctions propres ne sont plus des combinaisons linéaires de produits de fonctions propres à une particule. Dans ce cas, la description en terme de nombre d'occupation ne permet pas de rendre compte du phénomène de condensation de Bose-Einstein.

Or, historiquement, la condensation de Bose-Einstein est d'abord apparue comme un étrange phénomène issu de la théorie, mais inexistant dans la nature. Puis London a présenti en 1938 le lien entre la condensation de Bose-Einstein et le phénomène observé de superfluidité de l'Hélium 4. La superfluidité de l'hélium 4 est longtemps resté le seul

« exemple »de condensation de Bose-Einstein. Comme les atomes sont fortement en interaction dans l'Hélium 4, il devenait urgent de trouver une description de la condensation de Bose-Einstein adaptable aux gaz en interaction.

C'est pourquoi une autre définition que l'occupation macroscopique du niveau fondamental, plus générale, a été proposée par Penrose et Onsager.

1.2.3 Condensat et matrice densité réduite à une particule

En 1956, Penrose et Onsager [14] ont proposé un nouveau paramètre d'ordre pour la condensation de Bose-Einstein, plus général que l'occupation macroscopique d'un état. Leur définition fait intervenir la matrice densité réduite à une particule, qui est la trace de la matrice densité, sur toutes les particules sauf une :

$$\rho^{(1)}(x,x',\beta) = \frac{N}{Z_N}\int dx_2 dx_3 ... dx_N \rho(x,x_2,...,x_N;x',x_2,...,x_N). \tag{1.8}$$

Ils affirment qu'il existe un condensat de Bose-Einstein si et seulement si la matrice densité réduite à une particule admet une valeur propre macroscopique. Cette valeur propre macroscopique donne le nombre N_0 de bosons dans le condensat. Cette définition est valable pour tout gaz de Bose, avec ou sans interaction.

Cette dernière définition de la condensation de Bose–Einstein s'appuie sur la matrice densité. Or, la matrice densité bosonique s'exprime comme une intégrale de chemin. Voyons maintenant comment le formalisme de l'intégrale de chemin permet d'introduire les interactions.

1.2.4 Bosons en interactions : formule de Trotter

La formulation en intégrale de chemin permet d'introduire les interactions assez naturellement dans les calculs, grâce à la formule de Trotter (1959) [15]. Soit $\hat{H}$ le hamiltonien du système physique étudié, avec $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. $\hat{H}_0$ désigne le hamiltonien du système libre, et $\hat{V}$ les interactions. La matrice densité s'écrit $\hat{\rho} = e^{-\beta(\hat{H}_0+\hat{V})}$. A priori, $\hat{H}_0$ et $\hat{V}$ ne commutent pas, donc on ne peut pas factoriser la matrice densité. Cependant, dans la limite des hautes températures, la factorisation devient correcte ([11] p.144), d'après la formule de Trotter :

$$\rho(X,X',\beta) \sim_{\beta\to 0} e^{-\frac{1}{2}\beta V(X)}\rho_0(X,X',\beta)e^{-\frac{1}{2}\beta V(X')}. \tag{1.9}$$

Ici $\rho_0(X,X',\beta)$ est le coefficient en représentation position de la matrice densité pour le système sans interaction $e^{-\beta\hat{H}_0}$. Pour obtenir la matrice densité du système en interaction, à une température quelconque, on part de la limite Eq. (1.9), et la propriété de convolution des matrices densité

$$\int dX' \rho(X,X',\beta_1)\rho(X',X'',\beta_2) = \rho(X,X'',\beta_1+\beta_2) \tag{1.10}$$

permet par intégrations successives d'obtenir la matrice densité à des températures plus basses.

Ainsi la matrice densité à température β s'écrit

$$\begin{aligned}\rho(X,X',\beta) = \lim_{M\to\infty} \int dX_1 ... dX_{M-1} e^{-\frac{1}{2}\frac{\beta}{M}V(X)} \rho_0(X, X_1, \frac{\beta}{M}) e^{-\frac{1}{2}\frac{\beta}{M}V(X_1)} \\ e^{-\frac{1}{2}\frac{\beta}{M}V(X_1)} \rho_0(X_1, X_2, \frac{\beta}{M}) e^{-\frac{1}{2}\frac{\beta}{M}V(X_2)} ... \\ ... e^{-\frac{1}{2}\frac{\beta}{M}V(X_{M-1})} \rho_0(X_{M-1}, X', \frac{\beta}{M}) e^{-\frac{1}{2}\frac{\beta}{M}V(X)}. \end{aligned} \tag{1.11}$$

La matrice densité du gaz idéal est au coeur de ces formules. La compréhension du gaz idéal est donc essentielle pour ensuite ajouter les interactions. La géométrie du système et sa température déterminent le poids statistique des chemins pour le gaz idéal. La formule Eq. (1.11) permet d'introduire les interactions comme un coefficient correctif.

1.2.5 Intégrale de chemin et superfluidité

L'expérience de Hess-Fairbank, réalisée en 1967 [16], montre qu'à basse température, un liquide quantique tourne moins vite que le récipient qui le contient. A température nulle, la fraction normale tourne avec le récipient alors que la fraction superfluide reste au repos. Ce phénomène, appelé NCRI « Non Classical Rotational Inertia »se traduit mathématiquement par l'expression de la fraction superfluide en fonction d'une caractéristique topologique des chemins : la valeur moyenne du carré de leur indice d'enroulement $\langle W^2 \rangle$ (voir [17], et l'explication qui suit).

L'expérience est la suivante : un système de N bosons identiques est contenu dans un récipient formé de deux cylindres concentriques. Le cylindre extérieur est en rotation, la vitesse de rotation doit être faible (inférieure à la vitesse critique de l'ordre de $\hbar/(mR^2)$, où R désigne le rayon du récipient). A une température T assez haute, le système est en rotation uniforme avec le récipient. La température est ensuite abaissée. Alors, une fraction des bosons ralentit et s'arrête progressivement, jusqu'à devenir parfaitement immobile à $T = 0$: c'est la fraction superfluide. Les autres particules continuent à tourner avec le récipient : c'est la fraction normale. Pour conserver le moment angulaire, la fraction des atomes qui tournent, ainsi que le récipient se mettent alors à tourner un peu plus vite. Dans cette expérience, la chronologie est importante : le récipient est en rotation, puis la température est abaissée. On observe alors l'état d'équilibre du système. En revanche, une autre expérience consisterait à mettre en rotation le même système, à température déjà très basse. Alors seule une fraction des particules entrerait en rotation. Ce phénomène pourrait être interprété simplement comme la preuve que le système a une viscosité très faible, voire nulle, et pas comme le phénomène de NCRI [18].

La fraction superfluide est définie par :

$$\frac{\eta_s}{\eta} = 1 - \frac{I}{I_{cl}}, \tag{1.12}$$

où I désigne le moment d'inertie du système, et I_{cl} le moment d'inertie d'un système classique présentant la même géométrie que le système quantique (ici $I_{cl} \sim NmR^2$, avec m la masse d'un boson).

Dans [17], la définition Eq. (1.12) est traduite en fonction de l'indice d'enroulement W. La fraction superfluide est d'abord exprimée à partir de l'énergie libre F_v du système

en rotation à la vitesse v :

$$\frac{\eta_s}{\eta} = \frac{\partial(F_v/N)}{\partial(mv^2/2)}. \tag{1.13}$$

L'énergie libre est $F_v = -\log(Z)/\beta$, avec Z fonction de partition. Dans le calcul de la fonction de partition, les chemins qui font plusieurs tours du système doivent être pris en compte. On définit l'indice d'enroulement W d'un chemin comme le nombre de tours qu'il fait autour du cylindre. La géométrie du gaz contenu dans deux cylindres concentriques est similaire à une géométrie unidimensionnelle, avec des conditions aux limites périodiques. Alors, l'indice d'enroulement W d'un chemin est défini comme le le nombre de fois que ce chemin franchit les limites périodiques du système (voir Fig. 1.6).

L'énergie libre du système dont le récipient tourne à la vitesse v s'exprime au premier ordre en fonction de la valeur moyenne du carré de l'indice $\langle W^2 \rangle$, sur tous les chemins possibles :

$$\beta F_v = \beta F_{v=0} + \frac{m^2 v^2}{2\hbar^2} \frac{L^2 \langle W^2 \rangle_{v=0}}{D} + 0(v^4) \tag{1.14}$$

Cette dernière formule, associée à Eq. (1.13) donne l'expression de la fraction superfluide en fonction de l'indice W :

$$\frac{\eta_s}{\eta} = \frac{m}{\hbar^2} \frac{\langle W^2 \rangle L^2}{D\beta N}. \tag{1.15}$$

Cette formule est valable avec ou sans interaction, et exprime la fraction superfluide en fonction d'une caractéristique topologique des trajectoires en temps imaginaire.

Cette définition de la superfluidité découle de la formulation en intégrale de chemin, et la formule de Pollock et Ceperley Eq. (1.15) permet d'accéder numériquement à la fraction superfluide [19] (voir aussi [11] (3.1.4)).

1.2.6 Intégrale de chemin et calcul numérique : les simulations Monte-Carlo

Les calculs de Monte Carlo quantiques permettent d'accèder numériquement à la fonction de partition bosonique, afin d'obtenir des informations sur les propriétés thermodynamiques des systèmes de bosons à l'équilibre (fraction superfluide, fraction condensée, etc...). Ces simulations découlent de la formulation en intégrale de chemin de la fonction de partition, et sur la formule de Trotter Eq. (1.9). Le principe est de calculer la fonction de partition à température quelconque à partir de la fonction de partition à haute température, par produits de convolution successifs. La fonction de partition à haute température est factorisée en un terme libre et un terme d'interaction grâce à la formule de Trotter [11], [21].

Conclusion

Finalement, la formulation en intégrale de chemin du gaz de Bose permet d'aller au delà du gaz idéal, et d'étudier le gaz en interaction. Elle permet aussi de décrire la superfluidité à travers une caractéristique topologique des chemins : l'indice d'enroulement.

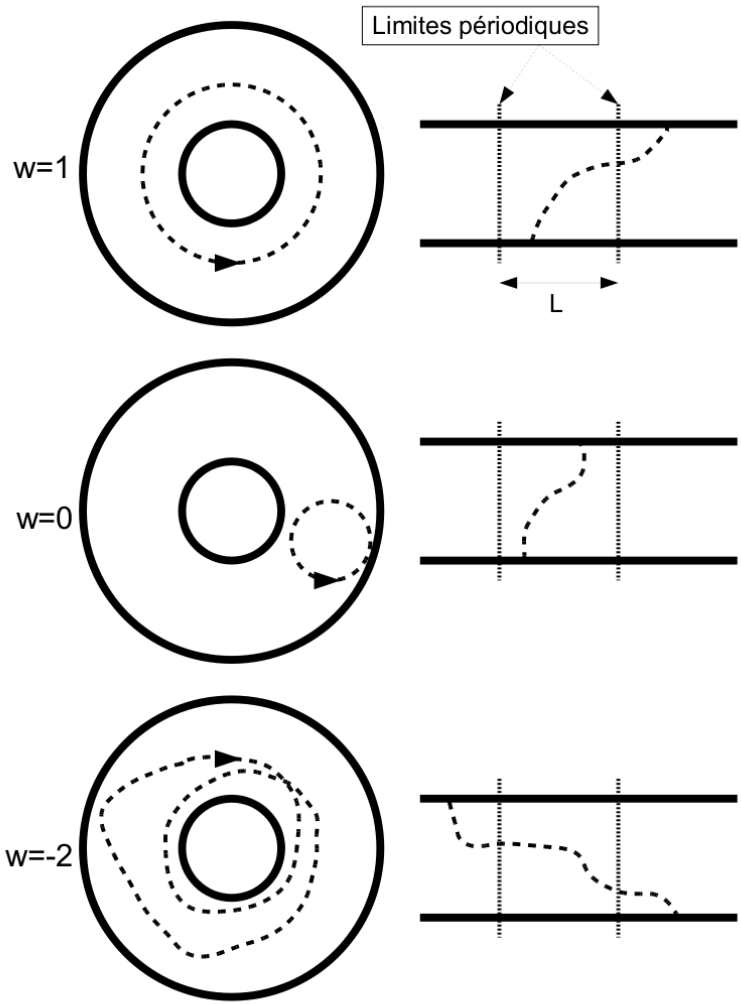


FIG. 1.6 – Indice d'un chemin. Dans la géométrie cylindrique, $W = 1$ signifie que le chemin fait une fois le tour du système, dans le sens trigonométrique. Dans une géométrie avec conditions aux limites périodiques, $W = 1$ signifie que le chemin traverse une fois la limite périodique du système, vers la droite.

Cette formulation constitue un pont de la physique quantique vers l'analyse combinatoire. Elle permet aussi d'aller vers des domaines plus concrets grâce aux simulations Monte Carlo, et de comprendre les expériences.

1.3 Présentation du travail réalisé

La formulation en intégrale de chemin du gaz de Bose, et la statistique des longueurs de cycles ont été au cœur de mon travail durant cette thèse.

Nous avons commencé par étudier le lien entre la condensation de Bose–Einstein et la présence de cycles longs. Feynman a proposé dès 1953 la présence de cycles de longueur infinie comme paramètre d'ordre de la condensation de Bose–Einstein. Le paramètre d'ordre donné par Penrose et Onsager est le caractère macroscopique de la plus grande valeur propre de la matrice densité à une particule.

Il est communément admis que ces deux paramètres d'ordre sont identiques, et les calculs numériques utilisent la distribution des longueurs de cycles pour calculer la fraction condensée [20]. Des papiers de physique mathématique s'intéressent à prouver l'équivalence entre ces deux paramètres d'ordre [25], [22], [23], [24].

Nous avons proposé une démonstration simple de cette équivalence pour le gaz idéal homogène tridimensionnel, ainsi que pour le gaz idéal dans un piège harmonique de dimension $D > 1$.

Condensation de Bose-Einstein et superfluidité sont deux phénomènes proches, puisqu'ils concernent les mêmes systèmes de bosons à basse température, et se caractérisent tous deux par des corrélations à longue portée dans le système. Cependant, il est clair que les deux phénomènes ne sont pas équivalents. Alors qu'il n'existe pas de condensat de Bose-Einstein pour le gaz bidimensionnel homogène, une transition vers une phase superfluide est possible. À partir de l'expression de la fraction superfluide en fonction de l'indice d'enroulement, nous étudions la relation entre la fraction superfluide et les cycles infinis.

Je présente des conjectures sur l'allure de la distribution des longueurs des cycles, et l'allure des trajectoires en temps imaginaire qui contribuent au calcul de la fonction de partition, pour les gaz bidimensionnels et tridimensionnels homogènes. Ces conjectures nous poussent à croire que la condensation de Bose–Einstein est caractérisée par des cycles de longueur moyenne proportionnelle au nombre total de particules N, alors que la superfluidité est caractérisée par une longueur moyenne des cycles en N^{α}, avec $\alpha < 1$.

2

Gaz de Bose idéal et statistique des longueurs de cycles

Le but de ce chapitre est d'introduire les outils nécessaires au chapitre trois, à travers l'exemple du gaz de Bose idéal (c'est-à-dire sans interaction). Pour un gaz de Bose sans interaction, quelle que soit la géométrie du système une formule récursive sur le nombre de bosons permet de calculer la fonction de partition dans l'ensemble canonique. Cette formule, démontrée par Landsberg en 1961 [26] s'appuie sur la décomposition des permutations en produit de cycles. Elle induit une mesure sur les longueurs des cycles dans les permutations. Après une démonstration de la formule de Landsberg, je rappelle le lien entre la distribution des longueurs de cycles et le nombre de bosons dans l'état fondamental, puis l'expression du paramètre d'ordre de la condensation de Bose–Einstein donné par Penrose et Onsager en fonction de la distribution des longueurs de cycles.

2.1 Fonction de partition et distribution des longueurs de cycle.

La formule de Landsberg Eq. (2.1) exprime la fonction de partition bosonique dans l'ensemble canonique de manière récursive.

$$Z_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} z_k Z_{N-k}, \tag{2.1}$$

où les z_k sont des coefficients dépendant de la température, définis par la suite Eq. (2.4). Dans cette formule, la distribution des longueurs de cycle Eq. (1.5) est déterminée de manière explicite, pour un système bosonique sans intéraction :

$$\pi_k = \frac{Z_{N-k} z_k}{N Z_N}.$$

La particularité du gaz sans interaction est que dans la formule Eq. (1.5) définissant la statistique des longueurs de cycles, le terme Z_P dépend uniquement des longueurs des cycles qui forment la permutation.

La formule de Landsberg se démontre à partir de l'expression de la matrice densité bosonique Eq. (1.2). La fonction de partition est la trace de la matrice densité donc :

$$Z_N = \int dX \rho^{\text{bos}}(X, X, \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S(N)} \int dX \rho^{\text{dis}}(X, PX, \beta).$$

La formule Eq. (2.1) découle des deux propriétés suivantes : premièrement, pour un système de particules sans interaction, la matrice densité pour N particules discernables se factorise en fonction de la matrice densité à une seule particule dans la même géométrie $\hat{\rho}_1$. C'est-à-dire, en représentation position :

$$\rho^{\text{dis}}(X, X', \beta) = \prod_{i=1}^{N} \rho_1(x_i, x_i', \beta).$$

La fonction de partition bosonique est donc :

$$Z_N = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S(N)} \prod_{i=1}^{N} \rho_1(x_i, x_{P(i)}, \beta). \tag{2.2}$$

Deuxièmement, les matrices densité obéissent à la propriété du produit de convolution Eq. (1.10) :

$$\int dx' \rho_1(x, x', \beta) \rho_1(x', x'', \beta') = \rho_1(x, x'', \beta + \beta'). \tag{2.3}$$

Puisqu'il s'agit de particules discernables, on peut les numéroter de 1 à N. La particule numéro 1 est arbitrairement isolée dans le calcul qui suit, de manière à introduire la longueur du cycle auquel appartient cette particule.

Au lieu de sommer sur toutes les permutations dans la formule Eq. (2.2), sommons sur le paramètre k variant de 1 à N, qui est la longueur du cycle auquel appartient la particule 1 dans une permutation donnée. Si k est fixé, il y a $C_{N-1}^{k-1} = (N-1)!/((k-1)!(N-k)!)$ choix pour les $k-1$ autres éléments du cycle parmi les $N-1$ particules restantes, puis $(k-1)!$ différents cycles possibles à former à partir des k éléments choisis. Les $N-k$ particules qui ne font pas partie du cycle forment un gaz idéal de $N-k$ bosons. La fonction de partition s'écrit donc :

$$Z_N = \frac{1}{N!} \sum_{k=1}^{N} \frac{(N-1)!}{(k-1)!(N-k)!} (k-1)! \int dx_1 ... dx_k \quad \rho_1(x_1, x_2, \beta) ... \rho_1(x_{k-1}, x_k, \beta) \rho_1(x_k, x_1, \beta)$$
$$\int dx_{k+1} ... dx_N \sum_{Q \in S(N-k)} \prod_{i=1}^{N-k} \rho_1(x_i, x_{Q(i)}, \beta).$$

L'intégration sur les variables x_2 à x_k s'effectue grâce à la propriété de convolution Eq. (2.3), et permet d'obtenir :

$$\int dx_1 \quad \rho_1(x_1, x_1, k\beta) = Z_1(k\beta) = z_k, \tag{2.4}$$

qui est la matrice densité pour une seule particule dans la même géométrie, à température inverse $k\beta$.

Le poids statistique du cycle de longueur k est donc proportionnel à la fonction de partition z_k pour une seule particule à température k fois plus basse que le système. Un cycle de longueur k est formellement équivalent à une seule particule à température k fois réduite. Les $N-k$ particules qui ne font pas partie du cycle sont indépendantes des particules du cycle. Elles contribuent à la fonction de partition comme un système bosonique à $N-k$ particules, par le facteur Z_{N-k}.

Après simplification des facteurs combinatoires, la formule de Landsberg est obtenue :

$$Z_N = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} z_k Z_{N-k}, \quad \text{avec} \quad z_k = \int dx_1 \rho_1(x_1, x_1, k\beta) = \sum_{\text{états propres à 1 part.}} e^{-k\beta\epsilon_n}.$$

Cette dernière expression définit la probabilité π_k qu'une particule quelconque appartienne à un cycle de longueur k, ainsi que la propriété de normalisation de la distribution des longueurs de cycle :

$$\pi_k = \frac{Z_{N-k} z_k}{N Z_N}, \quad \text{avec} \quad \sum_{k=1}^{N} \pi_k = 1. \tag{2.5}$$

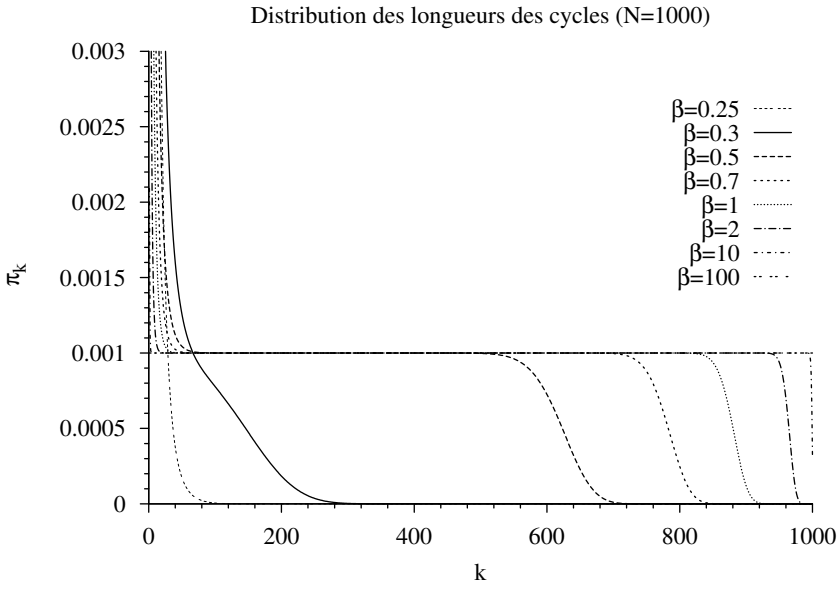


FIG. 2.1 – Distribution des longueurs de cycles pour le gaz homogène tridimensionnel en fonction de la température inverse β. A température nulle (cas presque atteint pour $\beta = 100$ sur la courbe), la distribution est constante : toutes les longueurs sont équiprobables. En revanche, lorsque la température augmente les cycles courts sont de plus en plus favorisés au détriment des cycles longs. La transition de Bose-Einstein a lieu pour $\beta = 0.3$ pour les paramètres de ce système (densité $\eta = 1$).

En fonction de la température du système, et de la géométrie considérée, l'allure de la distribution de probabilité π_k varie (Fig. 2.1). Cette distribution est liée à la présence ou non d'un condensat de Bose-Einstein. Feynman a proposé en 1953 [9] la présence de cycles infinis comme paramètre d'ordre de la condensation de Bose-Einstein.

2.2 Formule de la dérivée discrète.

Il existe un lien mathématique simple entre la distribution des longueurs des cycles et la distribution du nombre de particules dans le condensat pour un système sans interaction [11]. Cette relation est valable pour tout système idéal, et s'appuie sur la description traditionnelle de la condensation de Bose–Einstein comme occupation macroscopique du fondamental [2].

$Y(N,k,\sigma)$ est défini comme la contribution à la fonction de partition pour N bosons, des configurations dans lesquelles au moins k bosons occupent l'état σ d'énergie ϵ_σ.

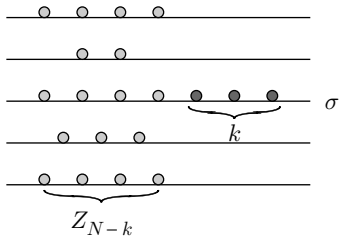


FIG. 2.2 – Configuration qui contribue à $Y(N,k,\sigma)$: au moins k bosons occupent l'état d'énergie ϵ_σ, et les $N-k$ autres bosons forment un gaz de Bose idéal, indépendant des k bosons de l'état σ (d'après [11]).

$Y(N,k,\sigma)$ se factorise en deux termes : $e^{-k\beta\epsilon_\sigma}$ qui correspond aux k bosons qui occupent l'état σ, et Z_{N-k} qui correspond au gaz libre constitué par les $N-k$ autres bosons (Fig. 2.2) :

$$Y(N,k,\sigma) = e^{-k\beta\epsilon_\sigma} Z_{N-k}. \tag{2.6}$$

$S(N,k,\sigma)$ est défini comme la contribution à Z_N des configurations dans lesquelles exactement k bosons occupent l'état d'énergie ϵ_σ. Y et S sont liés par :

$$Y(N,k,\sigma) = \sum_{k'=k}^{N} S(N,k',\sigma), \quad \text{donc} \quad S(N,k,\sigma) = Y(N,k,\sigma) - Y(N,k+1,\sigma). \tag{2.7}$$

À partir d'Eq. (2.6), sommer sur tous les niveaux d'énergie σ, permet de reconnaître la fonction de partition pour une particule libre :

$$\sum_\sigma Y(N,k,\sigma) = \sum_\sigma e^{-k\beta\epsilon_\sigma} Z_{N-k} = z_k Z_{N-k}. \tag{2.8}$$

D'après l'expression des poids statistiques des longueurs de cycle Eq. (2.5) et la formule Eq. (2.8),

$$\begin{aligned}\pi_k - \pi_{k+1} &= \frac{1}{NZ_N}\sum_\sigma \left(Y(N,k,\sigma) - Y(N,k+1,\sigma)\right) \\ &= \frac{1}{NZ_N}\sum_\sigma \Big(\sum_{k'=k}^{N} S(N,k',\sigma) - \sum_{k'=k+1}^{N} S(N,k',\sigma)\Big) = \frac{1}{NZ_N}\sum_\sigma S(N,k,\sigma).\end{aligned} \tag{2.9}$$

La dérivée discrète de la distribution des longueurs de cycles en k est, à un facteur de normalisation près, la somme sur tous les états σ, de la probabilité d'avoir exactement k bosons dans l'état σ.

Lorsque $k \gg 1$, les configurations dans lesquelles k bosons occupent un état excité sont très peu probables : en effet le poids statistique de ces configurations contient le facteur $e^{-k\beta\epsilon_\sigma}$, qui est exponentiellement petit pour ϵ_σ non nul. La contribution du terme $S(N,k,\text{fondamental})$ domine dans la somme (2.9). Donc pour $k \gg 1$,

$$\pi_k - \pi_{k+1} \sim_{k\gg 1} \frac{S(N,k,\text{fondamental})}{NZ_N}.$$

Dans cette dernière expression, $S(N,k,\text{fondamental})/Z_N$ est la probabilité de trouver exactement k bosons dans le fondamental pour un gaz de Bose à N particules. Ceci lie donc la dérivée discrète de la distribution de probabilité des cycles de longueur k avec la distribution de probabilité $P_N(N_0 = k)$ des configurations à N particules avec k bosons dans le fondamental (Fig. 2.3) :

$$\pi_k - \pi_{k+1} \sim_{k\gg 1} \frac{1}{N} P_N(N_0 = k). \tag{2.10}$$

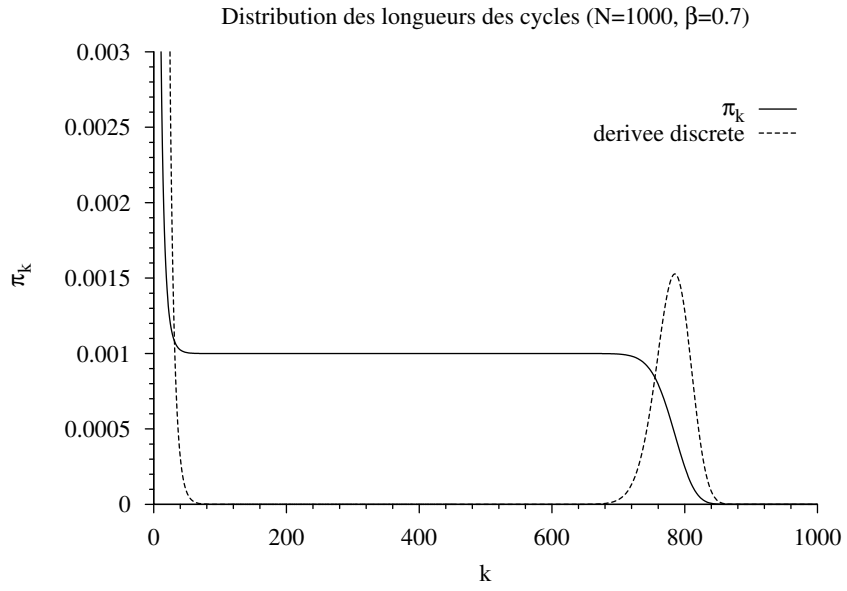


FIG. 2.3 – Le calcul de la distribution des longueurs de cycles donne accès au nombre de bosons dans le condensat. Cette courbe est réalisée pour un gaz homogène $3d$ avec conditions aux limites périodiques pour $N = 1000$ particules, à température inverse $\beta = 0.7$. La courbe appelée « dérivée discrète »est donnée par : $100(\pi_k - \pi_{k+1})$. Le pic de cette courbe a lieu en $k = N_0$, nombre de bosons dans le condensat.

Nombre d'occupation et statistique des cycles

La Section 1.2.2 présente la description du gaz de Bose idéal en terme de nombre d'occupation des niveaux d'énergie. Ces nombres d'occupation sont donnés dans l'ensemble

grand canonique par le facteur d'occupation bosonique, et la connaissance du potentiel chimique est nécessaire Eq. (1.6). Dans l'ensemble canonique, le nombre d'occupation moyen $\langle N_\sigma \rangle$ du niveau d'énergie σ est :

$$\langle N_\sigma \rangle = \sum_{k=1}^{N} k P_N(N_\sigma = k),$$

où $P_N(N_\sigma = k)$ désigne la probabilité d'avoir exactement k bosons dans l'état σ :

$$P_N(N_\sigma = k) = S(N, k, \sigma)/Z_N.$$

D'après Eq. (2.7), $\langle N_\sigma \rangle$ est une somme téléscopique. Connaissant l'expression Eq. (2.6) de Y, nous obtenons $\langle N_\sigma \rangle$:

$$\langle N_\sigma \rangle = \sum_{k=1}^{N} \frac{k}{Z_N} \left(e^{-k\beta\epsilon_\sigma} Z_{N-k} - e^{-(k+1)\beta\epsilon_\sigma} Z_{N-k-1} \right) = \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} e^{-k\beta\epsilon_\sigma}. \tag{2.11}$$

En particulier, cette formule donne la fraction condensée dans l'ensemble canonique :

$$\frac{N_0}{N} = \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N}. \tag{2.12}$$

Enfin, en dévéloppant en série le facteur d'occupation bosonique, l'expression du nombre d'occupation dans l'ensemble grand canonique est :

$$\langle N_\sigma(\mu) \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-k\beta\epsilon_\sigma} z^k \quad \text{avec} \quad z = e^{-\beta\mu}. \tag{2.13}$$

À la limite thermodynamique, les nombres d'occupation des états excités dans les ensembles canonique et grand canonique sont identiques. La comparaison des équations Eq. (2.11) et Eq. (2.13) permet de conclure

$$\frac{Z_{N-k}}{Z_N} \sim_{N\to\infty} z^k. \tag{2.14}$$

Ces dernières formules permettent de passer de l'ensemble canonique à l'ensemble grand canonique, et seront utiles au chapitre trois.

2.3 Matrice densité réduite à une particule pour le gaz idéal

Cette partie présente l'expression de la matrice densité réduite à une particule pour un système sans intéraction, en fonction de la distribution des longueurs de cycles π_k. Ceci permettra par la suite de démontrer de manière explicite l'équivalence entre le paramètre d'ordre de Penrose et Onsager [14] (valeur propre macroscopique de la matrice densité réduite à une particule) et celui de Feynman [9] (existence de cycles de longueur infinie) dans le cas du gaz sans interaction.

La matrice densité réduite à une particule en représentation position est définie comme la trace de l'opérateur densité sur toutes les particules sauf une Eq. (1.8) :

$$\rho^{(1)}(x,x',\beta) = \frac{N}{Z_N}\int dx_2...dx_N \rho^{bos}(x,x_2,...,x_N;x',x_2,...,x_N;\beta).$$

La normalisation est choisie de telle sorte que la trace de la matrice densité réduite à une particule donne le nombre total de particules dans le système. Ainsi

$$\int dx \rho^{(1)}(x,x,\beta) = N\frac{Z_N}{Z_N} = N \quad \text{et} \quad \rho^{(1)}(x,x,\beta) = \eta(x),$$

où $\eta(x)$ désigne la densité de particules au point x. En suivant pas à pas la démonstration de la formule de Landsberg Eq. (2.1), mais sans intégrer sur la variable x_1, nous obtenons le résultat suivant :

$$\rho^{(1)}(x,x',\beta) = \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N}\rho_1(x,x',k\beta) = N\sum_{k=1}^{N}\pi_k \frac{\rho_1(x,x',k\beta)}{z_k}. \tag{2.15}$$

Ainsi pour le gaz de Bose idéal, la matrice densité réduite à une particule est obtenue à partir de la distribution des longueurs de cycles et de la matrice densité pour une seule particule à différentes températures.

D'après Penrose et Onsager [14], la fraction condensée N_0/N est la plus grande valeur propre de la matrice densité réduite à une particule. Pour un système homogène, leur définition est équivalente à

$$\frac{N_0}{N} = \lim_{|x-x'|\to\infty} \rho^{(1)}(x,x',\beta). \tag{2.16}$$

Ceci se comprend aisément dans le cas du gaz idéal homogène, où la fonction d'onde du fondamental est une constante, qui est le seul terme qui subsiste dans l'expression $\rho^{(1)}(x,x',\beta)$ lorsque $|x-x'| \to \infty$. En effet, les autres fonctions d'onde oscillent et leur contribution est nulle dans cette limite.

Conclusion

Ce chapitre présente les principaux outils nécessaires à l'étude de la condensation de Bose-Einstein en terme de longueur des cycles dans les permutations. La distribution des longueurs des cycles est définie dans le cas idéal, à l'aide de la formule de Landsberg, puis le paramètre d'ordre de Penrose et Onsager est exprimé en fonction de la distribution des longueurs de cycles.

La formule de la dérivée discrète Eq. (2.10) montre que la statistique des longueurs de cycles et la condensation de Bose-Einstein sont étroitement liées, et fournit une méthode simple pour déterminer numériquement la fraction condensée dans un système bosonique.

La suite apporte des précisions sur la nature du lien entre la distribution des longueurs de cycle et la condensation de Bose–Einstein.

3

Condensation de Bose-Einstein et cycles infinis

Ce chapitre explicite le lien entre condensat de Bose-Einstein et cycles infinis pour un gaz idéal, dans deux géométries différentes. Il montre d'abord que la fraction condensée donnée par la définition de Penrose et Onsager est égale, à la limite thermodynamique, à la somme des poids statistiques des cycles de taille supérieure ou égale à N^x.

Dans le cas d'un gaz de Bose idéal homogène dans une boîte de dimension d, avec conditions aux limites périodiques, x vaut $D/2$. Dans le cas d'un gaz idéal dans un piège harmonique de dimension D, l'exposant x vaut $1/D$.

Nous montrons ensuite que s'il existe un condensat de Bose-Einstein, la longueur moyenne du cycle auquel appartient un boson quelconque est proportionnelle au nombre de particules N dans le système.

Enfin, l'éventualité que le poids statistique des cycles de longueur infinie soit non nul, en l'absence de condensat de Bose-Einstein, est discutée.

L'existence de cycles infinis à la limite thermodynamique (Section 3.1.1) est définie par la condition suivante :

$$\text{Il existe} \quad A(N) \quad \text{tel que} \lim_{N\to\infty} A(N) = +\infty \quad \text{et} \quad \lim_{N\to\infty} \sum_{k=A(N)}^{N} \pi_k > 0. \tag{3.1}$$

Dans la littérature ([22], [25]), la condition d'existence de cycles de longueur infinie est parfois écrite :

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lim_{\text{thermo}} \pi_k \leq \lim_{\text{thermo}} \sum_{k=1}^{N} \pi_k = 1. \tag{3.2}$$

3.1 Gaz idéal homogène tridimensionnel

L'objectif de cette partie est de montrer le résultat suivant :

$$\lim_{N\to\infty} \left(\frac{N_0}{N} - \sum_{k=L^2}^{N} \pi_k \right) = 0 \quad \text{avec} \quad \frac{N_0}{N} = \lim_{|r-r'|\to\infty} \rho^{(1)}(r, r', \beta), \tag{3.3}$$

pour un gaz de Bose idéal homogène, dans une boîte cubique avec conditions aux limites périodiques. Ce résultat établit l'équivalence entre le paramètre d'ordre de Penrose

et Onsager et celui proposé par Feynman. Il signifie que la fraction condensée N_0/N est égale à la somme des probabilités des cycles de longueur supérieure à L^2. La condensation de Bose-Einstein est donc équivalente, pour le système étudié, à l'existence de cycles de longueur infinie au sens de Eq. (3.1), avec $A(N) = N^{2/3}$.

3.1.1 Géométrie du système, limite thermodynamique

L'étude qui suit concerne un gaz de Bose sans intéraction, contenu dans une boîte de dimension D, et de côté L. La densité moyenne de particules dans la boîte est $\eta = N/L^D$. Pour prendre la limite thermodynamique du système, il faut augmenter infiniment le nombre de bosons dans la boîte, tout en augmentant la taille de la boîte de manière à ce que la densité moyenne de particules η reste constante. Dans la suite, on prendra $\eta = 1$ pour simplifier les écritures. La limite thermodynamique d'un système est prise à température constante.

Dans toute la suite, j'utilise les conditions aux limites périodiques. La fonction d'onde ψ d'une particule dans une boîte cubique, avec contitions aux limites périodiques vérifie les équations suivantes :

$$\psi(L/2, y, z) = \psi(-L/2, y, z) \quad \text{et} \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(L/2, y, z) = \frac{\partial \psi}{\partial x}(-L/2, y, z),$$

et de même pour les variables y et z. Pour un système à une dimension, confiner la particule sur un segment de longueur L avec conditions aux limites périodiques est en fait équivalent, à la limite $L \to \infty$, à la confiner sur un cercle de périmètre L.

3.1.2 Condensation de Bose-Einstein

Dans un gaz de Bose idéal homogène, la condensation de Bose-Einstein est possible en dimension D supérieure ou égale à 3. Pour $D < 3$, le nombre de saturation devient infini et il n'y a donc pas de condensat (voir Section 1.2.2).

Pour un gaz idéal homogène, la densité d'état $D(\epsilon)$ varie en $\epsilon^{(D-2)/2}$. Pour le gaz tridimensionnel homogène, $D(\epsilon) \sim \sqrt{\epsilon}$ donc le nombre de saturation Eq. (1.7) vaut

$$N_{\text{sat}}^{\text{hom}} = A_3 \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta\epsilon} - 1} = \frac{L^3}{(\hbar^2 2\pi\beta/m)^{3/2}} \zeta(\frac{3}{2}).$$

Le nombre de saturation détermine la température de transition en fonction du nombre N de particules dans le gaz : la température de transition est la température pour laquelle $N = N_{\text{sat}}$.

$$k_B T_{\text{BEC}}^{\text{hom}} = 2\pi \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{1}{\zeta(\frac{3}{2})} \frac{N}{L^3} \right)^{2/3}. \tag{3.4}$$

Dans la suite, afin d'alléger les écritures, je pose $\hbar = m = 1$.

3.1.3 Expression de la fraction condensée en terme de longueur de cycles

La fraction condensée est la plus grande valeur propre de la matrice densité réduite à une particule. Pour un système homogène, la plus grande valeur propre de la matrice

densité réduite à une particule est la limite pour $|x-x'| \to \infty$ du coefficient $\rho^{(1)}(x,x',\beta)$ de cette matrice [14], donc :

$$\frac{N_0}{N} = \lim_{|x-x'|\to\infty} \rho^{(1)}(x,x',\beta). \tag{3.5}$$

La condensation de Bose-Einstein se traduit donc par un ordre non diagonal à longue portée (*Off-Diagonal Long Range Order*, noté ODLRO), c'est-à-dire par le fait que le coefficient non diagonal de la matrice densité réduite à une particule, entre deux positions infiniment éloignées, est non nul.

Comme le coefficient $\rho^{(1)}(x,x',\beta)$ de la matrice densité réduite à une particule caractérise les corrélations entre les particules à la position x, et celles en x', la condensation de Bose-Einstein se traduit par des corrélations à très longue portée dans le système.

L'extension spatiale de l'onde associée à chaque particule est de l'ordre de la longueur de de Broglie $\lambda \sim \sqrt{2\pi\beta}$. J'ai montré en Section 2.1 qu'un cycle de longeur k est mathématiquement équivalent à une seule particule à température inverse $k\beta$. C'est-à-dire qu'un cycle se comporte comme une particule qui aurait la longueur de de Broglie effective $\sqrt{2\pi k\beta}$. Si cette longueur de de Broglie effective est de l'ordre de la taille du système étudié, le cycle contribue alors à l'ordre à longue portée. Les particules qui contribuent à l'ordre à longue portée sont celles qui appartiennent à des cycles de longueur k telle que $\sqrt{2\pi k\beta} \sim N^{1/D}$, c'est-à-dire $k \sim N^{2/D}$.

Afin de faire de cet argument qualitatif un véritable théorème, l'expression de la matrice densité réduite à une particule $\hat{\rho}^{(1)}$ en fonction de la statistique des longueurs de cycles, dans le cas particulier du gaz de Bose idéal homogène tridimensionnel, est nécessaire. D'après Eq. (2.15), il nous faut connaître la matrice densité ρ_1 pour une seule particule dans le système, ainsi que la fonction de partition z_k pour une seule particule à température inverse $k\beta$, c'est-à-dire les énergies propres et états propres pour une seule particule dans la boîte. La résolution de l'équation de Schrödinger donne les énergies propres :

$$\epsilon_n = 4\pi^2 n^2/(2L^2) \quad \text{avec} \quad n \in N^3,$$

et les états propres :

$$\psi_{\mathbf{n}}^{L,per}(x,y,z) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i2\pi(\frac{n_x x}{L} + \frac{n_y y}{L} + \frac{n_z z}{L})).$$

La matrice densité pour une seule particule est obtenue à l'aide d'une transformation de Poisson :

$$\rho_1(r,r',\beta) = \frac{1}{(2\pi\beta)^{d/2}} \sum_{w\in Z^D} \exp(-\frac{(wL+r-r')^2}{2\beta}).$$

Deux formules sont possibles pour la fonction de partition à une particule :

$$z_k = \left(\frac{L}{\sqrt{2\pi k\beta}} \sum_{w\in Z} \exp(-\frac{w^2L^2}{2k\beta})\right)^D \quad \text{ou} \quad z_k = \left(\sum_{w\in Z} \exp(-\frac{2\pi^2 k\beta w^2}{L^2})\right)^D \tag{3.6}$$

La matrice densité réduite à une particule pour ce système s'écrit :

$$\rho^{(1)}(x,x',\beta) = \sum_{k=1}^{N} \pi_k \frac{\sum_{w\in Z^D} \exp\left(-\frac{(w+x-x')^2}{2k\beta}\right)}{\sum_{w\in Z^D} \exp\left(-\frac{(w^2}{2k\beta}\right)} \tag{3.7}$$

Dans la suite, nous calculons la limite du coefficient non diagonal de la matrice densité réduite lorsque $|x - x'| \to \infty$. Dans une boîte avec conditions aux limites périodiques, il suffit de connaître la limite de $\rho^{(1)}(x, x', \beta)$ lorsque $L \to \infty$ avec $|x - x'| = \delta L$ et $0 < \delta \leq 1/2$. Pour s'implifier les notations j'introduis la fonction $R_k(\delta)$ telle que pour $|x - x'| = \delta L$:

$$\rho^{(1)}(x, x', \beta) = \sum_{k=1}^{N} \pi_k R_k(\delta) \quad \text{c'est-à-dire} \quad R_k(\delta) = \frac{L^d \rho_1(0, \delta L, k\beta)}{z_k}. \tag{3.8}$$

D'après la formule Eq. (2.16), la fraction condensée vaut la limite pour $L \to \infty$ de $\sum_{k=1}^{N} \pi_k R_k(\delta)$. Et donc l'étude de π_k et celle de R_k vont être utiles pour démontrer le résultat Eq. (3.3).

3.1.4 Démonstration du théorème Eq. (3.3)

Notations

Les notations suivantes sont utilisées, comme dans [27] :
- $A \sim B \Leftrightarrow \lim_{N\to\infty} \frac{A}{B} = 1$
- $A \ll B \Leftrightarrow \lim_{N\to\infty} \frac{A}{B} = 0$
- $A \gg B \Leftrightarrow \lim_{N\to\infty} \frac{A}{B} = +\infty$
- $A \propto B \Leftrightarrow \lim_{N\to\infty} \frac{A}{B} = \text{const} > 0$
- $A \lesssim B \Leftrightarrow \lim_{N\to\infty} \frac{A}{B} \leq 1$.

Etude des π_k et R_k

A la limite thermodynamique, deux régimes apparaissent, suivant la longueur k du cycle par rapport à la quantitié L^2. Les fonctions de partition z_k ont pour approximations les expressions suivantes (on reconnaît des sommes de Riemann) :

$$\begin{aligned} \frac{z_k}{N} &\sim \frac{1}{N}\left(\frac{L}{(2\pi\beta k)^{1/2}}\right)^D = \left(\frac{1}{(2\pi\beta k)^{1/2}}\right)^D \quad \text{pour} \quad k \ll \frac{L^2}{2\pi\beta} = \frac{L^2}{\lambda^2} \\ \frac{z_k}{N} &\sim \frac{1}{N} \quad \text{pour} \quad k \gg \frac{L^2}{2\pi\beta} = \frac{L^2}{\lambda^2}. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Remarquons tout de suite que si la dimension est inférieure ou égale à 2, le cas $k \gg L^2$ n'existe pas. Cette remarque est en lien avec le fait qu'il n'existe pas de condensat pour $D < 3$ pour un gaz homogène.

Comme $Z_{N-k} \leq Z_N$, les estimations précédentes de z_k fournissent des majorants aux coefficients π_k.

La fonction de coupure R_k a pour expression (avec $x = 2\beta k/L^2 = (\lambda/L)^2 k/\pi$) :

$$R_k(\delta) = \left(\frac{\sum_{w=-\infty}^{\infty} e^{-(\delta+w)^2/x}}{\sum_{w=-\infty}^{\infty} e^{-w^2/x}}\right)^3.$$

Si $x \to 0$, les deux sommes de la fraction sont dominées par leur terme $w = 0$. Ainsi,

$$R_k(\delta) \sim_{k \ll L^2} e^{-3\delta^2 L^2/(2\beta k)}. \tag{3.10}$$

En appliquant la formule sommatoire de Poisson au numérateur et au dénominateur, on obtient l'expression de la fonction de coupure R_k à partir de la fonction elliptique θ_3 :

$$R_k(\delta) = \left(\frac{\theta_3(\delta\pi, e^{-\pi^2 x})}{\theta_3(0, e^{-\pi^2 x})} \right)^3 \quad \text{avec} \quad \theta_3(u,q) = 1 + 2\sum_{w=1}^{\infty} q^{w^2} \cos(2wu). \tag{3.11}$$

Pour u fixé, θ_3 est une fonction analytique de q sur $[0,1[$. Son comportement à l'origine est donné par les premiers coefficients de son développement en série entière. Pour $q \to 0$, $\theta_3(u,q) \sim 1 + 2\cos(2u)q$ donc :

$$R_k(\delta) \sim_{k \gg L^2} \left(\frac{1 + 2\cos(2\delta\pi)e^{-\pi^2 x}}{1 + 2e^{-\pi^2 x}} \right)^3 \sim 1 - 6(1 - \cos(2\delta\pi))e^{-\pi^2 2\beta k/L^2}. \tag{3.12}$$

Pour la démonstration qui suit, les propriétés suivantes seront utilisées :
- a- π_k est une suite décroissante.
- b- La somme des π_k vaut 1 (normalisation des probabilités).
- c- $\pi_k \lesssim 1/(2\pi\beta k)^{3/2}$ pour $k \ll L^2$.
- d- $\pi_{L^2} \lesssim$ constante$/L^3$.
- e- R_k est une suite positive croissante.
- f- $1 - R_k$ est une suite positive décroissante.
- g- R_{L^2} ne dépend pas de L.
- h- pour $k \ll L^2$ on a $\lim_{L\to\infty} R_k = 0$ d'après Eq. (3.11).
- i- pour $k \gg L^2$ on a $\lim_{L\to\infty}(1 - R_k) = 0$ d'après Eq. (3.12).

Démonstration

Montrer le résultat Eq. (3.3) est équivalent à montrer que la limite suivante est nulle :

$$\lim_{L\to\infty} \left(\sum_{k=1}^{N} \pi_k R_k - \sum_{k=L^2}^{N} \pi_k \right).$$

Pour cela, la somme se découpe en quatre morceaux (Fig. 3.1), et chacun de ces morceaux a une limite nulle pour L grand. Soit ϵ un petit paramètre dont la valeur sera fixée ultérieurement.

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N} \pi_k R_k - \sum_{k=L^2}^{N} \pi_k &= \sum_{k=1}^{L^{2-\epsilon}} \pi_k R_k + \sum_{k=L^{2-\epsilon}}^{L^2} \pi_k R_k + \sum_{k=L^2}^{L^{2+\epsilon}} \pi_k (R_k - 1) + \sum_{k=L^{2+\epsilon}}^{N} \pi_k (R_k - 1) \\ &= A(\epsilon) + B(\epsilon) + C(\epsilon) + D(\epsilon) \end{aligned}$$

En toute rigueur, il faudrait sommer dans la première somme jusqu'à $k = E[L^{2-\epsilon}] - 1$, et commencer la deuxième somme en $k = E[L^{2-\epsilon}]$, où $E[x]$ désigne la partie entière de

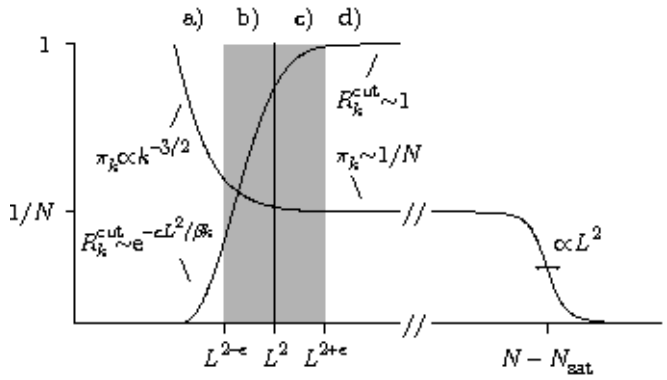


FIG. 3.1 – Distribution des longueurs de cycle π_k et fonction de coupure R_k, pour un gaz de Bose idéal dans une boîte cubique avec conditions aux limites périodiques. La fonction de coupure fait disparaître de la somme Eq. (3.8) les termes $k \ll L^2$. [27]

x. Comme cette précision ne change rien à la démonstration mais alourdit les notations, j'ai choisi de ne pas l'écrire.

Voyons maintenant la limite pour L grand de chacun des termes. Pour évaluer A, les propriétés a, b, d et g permettent de conclure :

$$A(\epsilon) \leq R_{L^{2-\epsilon}} \sum_{k=1}^{L^{2-\epsilon}} \pi_k \leq e^{-3\delta^2 L^\epsilon/(2\beta)} \to 0.$$

Ceci est vrai pour tout ϵ strictement positif.

Pour le terme $B(\epsilon)$, les propriétés a, c et e impliquent que pour tout $\epsilon < 2/3$ on a :

$$B(\epsilon) \leq R_{L^2} \pi_{L^{2-\epsilon}} L^2 \sim \text{constante} \frac{L^2}{(2\pi\beta L^{2-\epsilon})^{3/2}} \sim \text{constante} \frac{1}{L^{1-3\epsilon/2}} \to 0.$$

Pour le terme $|C(\epsilon)|$ j'utilise les propriétés a d f et g :

$$|C(\epsilon)| \leq \pi_{L^2}(1 - R_{L^2}) L^{2+\epsilon} \sim \text{constante} \frac{1}{L^{1-\epsilon}} \to 0,$$

tant que $\epsilon < 1$.

Enfin, pour le terme $|D(\epsilon)|$ les propriétés a et f impliquent que pour tout ϵ strictement positif :

$$|D(\epsilon)| \leq \pi_{L^{2+\epsilon}} |1 - R_{L^{2+\epsilon}}| L^3 \sim 1 - R_{L^{2+\epsilon}} \to 0. \tag{3.13}$$

Cette démonstration est correcte pour tout ϵ strictement compris entre 0 et 2/3.

Conclusion

À la limite thermodynamique, la différence entre le paramètre d'ordre à longue portée et la somme des poids statistiques des cycles de longueur supérieure à L^2 tend vers 0.

La formule Eq. (3.3) signifie que la fraction condensée est égale à la contribution à la fonction de partition des cycles de taille supérieure à L^2. Or, un cycle de longueur

k est mathématiquement équivalent à une seule particule, qui serait à une température k fois plus basse que le système. La longueur de de Broglie d'une telle particule vaut $\sqrt{2\pi k\beta} = \sqrt{k}\lambda$, c'est-à-dire que l'étalement spatial d'un cycle de longueur k dans une direction quelconque est de l'ordre de $\sqrt{k}\lambda$. Ainsi, les cycles de longueur L^2 représentent un étalement de $L\lambda$, c'est-à-dire de l'ordre de la taille de la boîte (voir Fig. 3.2).

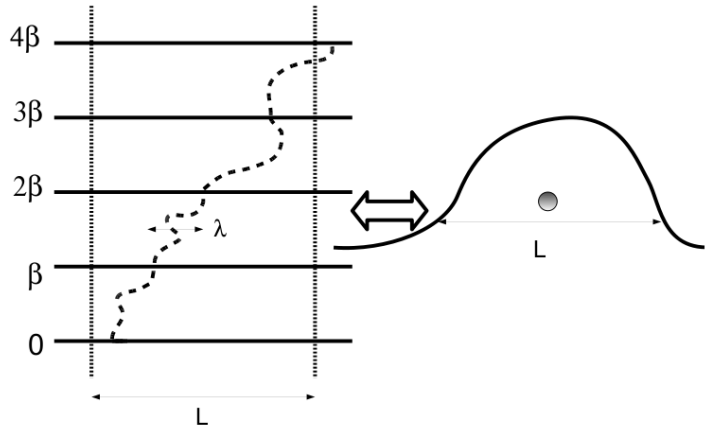


FIG. 3.2 – Un cycle de longueur L^2 est formellement équivalent à une seule particule, à température plus basse que le gaz, dont la longueur de de Broglie est de l'ordre de la taille L du système. L'existence d'un tel cycle contribue à créer un ordre à longue portée dans le système.

Pour le gaz tridimensionnel homogène idéal, le paramètre d'ordre de Penrose et Onsager est donc équivalent à celui de Feynman. Le cas des gaz piégés harmoniquement est utile pour comprendre les résultats de nombreuses expériences actuelles sur les atomes froids. Il fait l'objet de la partie suivante.

3.2 Gaz idéal dans un piège harmonique de dimension $d > 1$

Le but de cette partie est de montrer le résultat :

$$\lim_{N\to\infty}\left(\frac{N_0}{N} - \sum_{k=N^{1/D}}^{N}\pi_k\right) = 0 \quad \text{avec} \quad N_0 = \langle 0|\hat{\rho}^{(1)}|0\rangle, \tag{3.14}$$

pour le gaz de Bose idéal dans un piège harmonique de dimension $D > 1$. Ce résultat montre que la condensation de Bose-Einstein est équivalente, pour le système étudié, à l'existence de cycles infinis au sens de Eq. (3.1), avec $A(N) = N^{1/D}$.

3.2.1 Définition de la limite thermodynamique

Il s'agit de faire tendre le nombre de bosons dans le piège vers l'infini, en augmentant simultanément la taille du piège afin que la densité moyenne de particules reste constante. Pour le gaz homogène, la densité de particule N/V est une constante fixée pour définir

la limite thermodynamique. Pour le gaz piégé, la quantité N/R^D est fixée, avec R la taille typique du nuage d'atomes. Pour un piège harmonique, $R \sim \sqrt{k_B T/(m\omega^2)}$ est l'extension typique du nuage thermique. Le rapport N/R^D est constant, donc $(\hbar\omega)^D N$ reste constant. Posons $(\hbar\omega)^D N = \alpha^D$, où α est une constante qui caractérise le piège, et qui a la dimension d'une énergie. Cette condition est similaire à $\eta = N/V$ constante pour le système homogène.

3.2.2 Condensation de Bose-Einstein

Dans un gaz de Bose idéal piégé harmoniquement, la condensation de Bose-Einstein est possible en dimension D supérieure ou égale à 2. Pour $D < 2$, le nombre de saturation est infini et il n'y a donc pas de condensat à température non nulle (Section 1.2.2).

La densité d'état du gaz piégé harmoniquement varie en ϵ^{D-1}, en fonction de la dimension D du système [30]. Pour un gaz tridimensionnel piégé, $D(\epsilon) \sim \epsilon^2$ donc le nombre de saturation défini en Eq. (1.7) vaut

$$N_{\mathrm{sat}}^{3d} = \frac{\zeta(3)}{(\hbar\omega\beta)^3}.$$

La température de transition est la température pour laquelle $N = N_{\mathrm{sat}}$, c'est-à-dire :

$$k_B T_{\mathrm{BEC}}^{3d} = \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{1/3} \hbar\omega.$$

Le gaz de Bose dans un piège harmonique bidimensionnel a également une température de transition vers un condensat. La densité d'état vérifie $D(\epsilon) \sim \epsilon$, donc le nombre de saturation vaut

$$N_{\mathrm{sat}}^{2d} = \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right)^2,$$

et la température de transition est

$$k_B T_{\mathrm{BEC}}^{2d} = \sqrt{\frac{N}{\zeta(2)}}\hbar\omega. \tag{3.15}$$

Dans la suite, la fraction condensée du gaz idéal harmoniquement piégé est exprimée en fonction de la distribution des longueurs de cycles.

3.2.3 Expression de la fraction condensée en terme de longueur de cycles

Pour le gaz de Bose idéal, la condensation de Bose-Einstein se traduit par l'occupation macroscopique de l'état fondamental à une particule $|0\rangle$. La matrice densité réduite à une particule $\hat{\rho}^{(1)}$ est diagonale dans la base des états propres à une particule, et le nombre de bosons dans le condensat s'écrit :

$$N_0 = \langle 0|\hat{\rho}^{(1)}|0\rangle = \int d^D\vec{x} d^D\vec{x}' \psi_0^*(\vec{x})\psi_0(\vec{x}')\rho^{(1)}(\vec{x},\vec{x}',\beta), \tag{3.16}$$

où ψ_0 est la fonction d'onde du fondamental du piège harmonique.

D'après Eq. (2.15), la matrice densité réduite à une particule est connue à partir de la matrice densité pour une seule particule dans le système ρ_1. Un système composé d'une seule particule dans un piège harmonique a pour énergies propres $\epsilon_{\mathbf{n}} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + D/2)$, et les fonctions propres s'expriment à l'aide des polynômes de Hermite. Si on translate l'origine des énergies afin que le niveau fondamental ait l'énergie nulle, la matrice densité $\rho_1^{1d,\omega}$ pour une seule particule dans un piège unidimensionnel de pulsation ω s'écrit [11] :

$$\rho_1^{1d,\omega}(x,x',\beta) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{1-e^{-2\hbar\omega\beta}}}\exp -\left(\frac{(x+x')^2}{4}\frac{m\omega}{\hbar}\tanh(\frac{\hbar\omega\beta}{2})\right) \exp -\left(\frac{(x-x')^2}{4}\frac{m\omega}{\hbar}\coth(\frac{\hbar\omega\beta}{2})\right). \tag{3.17}$$

Pour un piège de dimension $D > 1$, la matrice densité s'exprime à l'aide de $\rho_1^{1d,\omega}$. En particulier, en trois dimensions :

$$\rho_1^{3d}(\vec{x},\vec{x'},\beta) = \rho_1^{1d,\omega_x}(x,x',\beta)\rho_1^{1d,\omega_y}(y,y',\beta)\rho_1^{1d,\omega_z}(z,z',\beta).$$

La fonction de partition pour une seule particule dans le piège à température inverse $k\beta$ est donc :

$$z_k = \prod_{i=1}^{D} z_k^{1d,\omega_i} \quad \text{avec} \quad z_k^{1d,\omega} = \frac{1}{1-e^{-k\beta\hbar\omega}}. \tag{3.18}$$

D'après Eq. (3.16) et Eq. (3.17), la fraction condensée s'écrit

$$\frac{N_0}{N} = \sum_{k=1}^{N}\frac{Z_{N-k}z_k}{NZ_N}R_k, \quad \text{où} \quad \pi_k = \frac{Z_{N-k}z_k}{NZ_N},$$

avec

$$R_k = \frac{1}{z_k}\prod_{i=1}^{D}(\frac{m\omega_i}{\pi\hbar})\int dx_i dx_i' e^{\frac{m\omega}{2\hbar}(x_i^2+x_i'^2)}\rho_1^{1d}(x_i,x_i',k\beta,\omega_i).$$

L'étude de π_k et celle de R_k vont être utiles pour démontrer le résultat Eq. (3.14).

3.2.4 Démonstration du théorème Eq. (3.14)

À la limite thermodynamique, deux régimes apparaissent, suivant la longueur k du cycle par rapport à la quantité $N^{1/D}$. J'utilise les mêmes notations $\ll$, $\gg$, $\lesssim$, etc... que pour le cas homogène. Les fonctions de partition z_k ont pour approximations les expressions suivantes :

- si $k\beta\hbar\omega \ll 1$, c'est-à-dire $k \ll N^{1/D}$ alors $\frac{z_k}{N} \sim 1/(N(k\beta\hbar\omega)^D) = \frac{1}{(k\beta)^D}$.
- si $k\beta\hbar\omega \gg 1$, c'est-à-dire $k \gg N^{1/D}$ alors $\frac{z_k}{N} \sim 1/N$.

Posons $x = k\beta/N^{1/D}$. L'expression simplifiée de la fonction de coupure est :

$$R_k = \left(\frac{e^x - e^{-x}}{e^x}\right)^{D/2}\frac{(1-e^x)^D}{(1-e^{-2x})^{D/2}} = (1-e^x)^D.$$

Donc

$$R_k \sim \frac{(k\beta)^D}{N} \quad \text{pour} \quad k \ll N^{1/D}, \tag{3.19}$$

et

$$R_k \sim 1 \quad \text{et} \quad (1-R_k) \sim De^{-\frac{k\beta}{N^{1/D}}} \quad \text{pour} \quad k \gg N^{1/D}. \tag{3.20}$$

La même démonstration que pour le gaz homogène est valable, en remplaçant L^2 par $N^{1/D}$. En effet, les π_k et la fonction de coupure R_k vérifient encore :

- a- π_k est une suite décroissante.
- b- La somme des π_k vaut 1 (normalisation des probabilités).
- c- $\pi_k \lesssim (k\beta)^D/N$ pour $k \ll N^{1/D}$.
- d- $\pi_{N^{1/D}} \lesssim$ constante$/N$.
- e- R_k est une suite positive croissante.
- f- $1-R_k$ est une suite positive décroissante.
- g- $R_{N^{1/D}}$ ne dépend pas de N.
- h- pour $k \ll N^{1/D}$ on a $\lim_{N\to\infty} R_k = 0$ d'après Eq. (3.19).
- i- pour $k \gg N^{1/D}$ on a $\lim_{N\to\infty}(1-R_k) = 0$ d'après Eq. (3.20).

La démonstration du résultat Eq. (3.14) se calque exactement sur la démonstration du résultat Eq. (3.3) : la somme est découpée en quatre morceaux, autour de $N^{1/D}$ cette fois.

3.2.5 Conclusion

Pour un gaz piégé harmoniquement, en dimension D, la fraction condensée est égale, à la contribution à la fonction de partition des cycles de longueur supérieure à $N^{1/D}$. Ces cycles correspondent mathématiquement à des particules effectives qui seraient à température inverse $N^{1/D}\beta$, et qui auraient une longueur de de Broglie effective de l'ordre de $N^{1/(2D)}\lambda$.

La condensation de Bose–Einstein est associée l'existence de cycles de longueur infinie, à la limite thermondynamique. Ce sont les cycles de longueur comprise en N^x et N qui contribuent au condensat. La suite évalue la valeur moyenne de la distribution de la longueur des cycles, en fonction de la présence ou non du condensat.

3.3 Longueur moyenne des cycles et fraction condensée

Le paramètre étudié dans cette partie est la longueur moyenne du cycle auquel appartient une particule quelconque, notée $\langle l \rangle$.

Pour un gaz homogène, s'il existe une phase condensée dans le système, la longueur moyenne des cycles est macroscopique, c'est-à-dire $\langle l \rangle / N$ a une limite strictement positive lorsque $N \to \infty$. En revanche en l'absence de condensat $\langle l \rangle / N$ a une limite nulle pour N grand.

La longueur moyenne des cycles $\langle l \rangle$ s'exprime

$$\langle l \rangle = \sum_{k=1}^{N} k\pi_k. \tag{3.21}$$

Commençons par le cas non condensé, à travers les exemples du gaz homogène bidimensionnel à toute température, ainsi que du gaz tridimensionnel à température supérieure à la température de transition T_{BEC}^{3d} (Eq. (3.4)).

3.3.1 Longueur moyenne des cycles en l'absence de condensat

Cette partie explique à travers deux exemples pourquoi, en l'absence de condensat, la longueur moyenne des cycles $\langle l \rangle$ n'est pas macroscopique.

Exemple du gaz idéal homogène bidimensionnel

Absence de condensation de Bose–Einstein La densité d'état est constante pour le gaz homogène bidimensionnnel. Le nombre de bosons dans le système, en fonction du potentiel chimique s'exprime :

$$N(\mu) = \frac{L^2}{\lambda^2} \int_0^\infty \frac{du}{e^{u-\beta\mu} - 1}.$$

Lorsque μ tend vers zéro, $N(\mu)$ devient infini. Donc quel que soit le nombre de bosons dans le système, il existe un potentiel chimique μ non nul qui satisfait la relation : $N = N(\mu)$. C'est pourquoi il n'y a pas accumulation des bosons dans le niveau fondamental. Ceci se traduit aussi par le fait que le nombre de saturation est infini :

$$N_{\mathrm{sat}}^{2d,\mathrm{hom}} = \lim_{\mu \to 0} \ln(1 - e^{\beta\mu}) = +\infty. \tag{3.22}$$

La condensation de Bose-Einstein est donc impossible pour le gaz idéal bidimensionnel homogène, autrement dit,

$$\lim_{N\to\infty} \frac{N_0}{N} = 0. \tag{3.23}$$

Longueur moyenne des cycles Ce paragraphe montre que la longueur moyenne $\langle l \rangle$ du cycle auquel appartient une particule quelconque n'est pas macroscopique, c'est-à-dire

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\langle l \rangle}{N} = 0.$$

La connaissance d'un majorant de $\langle l \rangle$ Eq. (3.21), à partir d'un majorant de π_k, est utile pour montrer le résultat ci-dessus.

Majorant de $\langle l \rangle$ L'expression des fonctions de partition à une particule z_k pour un système homogène idéal de dimension D est donnée par Eq. (3.6). En vertu du théorème de comparaison des séries et intégrales d'une fonction décroissante, la majoration suivante est obtenue :

$$\begin{aligned} z_k &= \left(\sum_{w \in Z} e^{-2\pi^2 k\beta w^2/L^2} \right)^D = \left(1 + 2 \sum_{w=1}^{\infty} e^{-2\pi^2 k\beta w^2/L^2} \right)^D \\ &\leq \left(2 \int_0^\infty e^{-2\pi^2 k\beta w^2/L^2} dw + 1 \right)^D = \left(\frac{L}{\sqrt{2\pi\beta k}} + 1 \right)^D . \end{aligned} \tag{3.24}$$

L'inégalité Eq. (3.24) avec $D = 2$ fournit un majorant de $\langle l \rangle$:

$$\langle l \rangle \leq \frac{1}{2\pi\beta} \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} + \frac{2}{\sqrt{2\pi\beta}L} \sum_{k=1}^{N} \sqrt{k} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} + \frac{1}{L^2} \sum_{k=1}^{N} k \frac{Z_{N-k}}{Z_N}. \tag{3.25}$$

D'après Eq. (2.12), le premier terme $\frac{1}{2\pi\beta} \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N}$ de ce majorant s'exprime en fonction du nombre N_0 de bosons dans le condensat :

$$\frac{1}{2\pi\beta} \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} = N_0/(2\pi\beta).$$

La propriété Eq. (2.14) permet d'évaluer les deuxième et troisième termes : $\lim_{N\to\infty} Z_{N-k}/Z_N = z^k$.

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \sqrt{k} \leq \lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \sqrt{k} = \sum_{k=1}^{\infty} \sqrt{k} z^k,$$

cette série converge (notons S sa somme) car en l'absence de condensat, la fugacité z est strictement inférieure à 1 . Donc

$$\frac{2}{\sqrt{2\pi\beta}L} \sum_{k=1}^{N} \sqrt{k} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \leq \frac{2S}{\sqrt{2\pi\beta}L}.$$

Ainsi, la limite de ce terme pour $L \to \infty$ est nulle.

Enfin,

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} k \leq \lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} k = \sum_{k=1}^{\infty} k z^k = \frac{z}{(1-z)^2},$$

donc le dernier terme de la somme Eq. (3.25) est majoré par $z/(N(1-z)^2)$, qui a une limite nulle pour $N \to \infty$.

En conclusion,

$$\lim_{N\to\infty} \langle l \rangle \leq \frac{N_0}{2\pi\beta} \quad \text{donc} \quad \lim_{N\to\infty} \frac{\langle l \rangle}{N} = 0, \tag{3.26}$$

car en l'absence de condensat, Eq. (3.23) montre que le nombre de particules dans le fondamental n'est pas macroscopique.

Cas homogène tridimensionnel pour $T > T_{\mathbf{BEC}}^{\mathbf{hom}}$

Ce paragraphe montre que pour le gaz homogène tridimensionnel au-dessus de la température critique, la longueur moyenne des cycles $\langle l \rangle$ n'est pas macroscopique. Pour cela, l'inégalité Eq. (3.24), avec $D = 3$ fournit un majorant à la longueur moyenne des cycles :

$$\langle l \rangle \leq \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \frac{1}{(2\pi\beta)^{2/3}\sqrt{k}} + \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \frac{3}{2\pi\beta L} + \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \frac{3\sqrt{k}}{\sqrt{2\pi k\beta}} + \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} k.$$

Notons le premier terme de cette somme A. En utilisant la propriété Eq. (2.14) et en intervertissant la limite et la somme, A est majoré par :

$$\lim_{N\to\infty} A \leq \lim_{N\to\infty} \frac{1}{(2\pi\beta)^{2/3}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \frac{1}{\sqrt{k}} = \frac{1}{(2\pi\beta)^{2/3}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{\sqrt{k}} = \frac{1}{(2\pi\beta)^{2/3}} \zeta_{1/2}(z).$$

Ce majorant est une quantité finie, car la fugacité z est un réel strictement inférieur à 1 en l'absence de condensat.

D'après la formule Eq. (2.12), le deuxième terme B s'exprime exactement en fonction du nombre de particules dans l'état fondamental : $B = 3N_0/(2\pi\beta L)$.

La propriété Eq. (2.14) permet de majorer le troisième terme C :

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \sqrt{k} \leq \lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \sqrt{k} = \sum_{k=1}^{\infty} \sqrt{k} z^k.$$

Comme cette somme converge (puisque $z < 1$), en conclusion : $C \leq 3\text{cste}/(2\pi\beta L^2)$. Cette quantité à une limite nulle pour $N \to \infty$.

Enfin, le dernier terme $\lim_{N\to\infty} D$ est majoré par $\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{\infty} k z^k = 0$.

En conclusion,

$$\lim_{N\to} \langle l \rangle \leq \frac{1}{(2\pi\beta)^{2/3}} \zeta_{1/2}(z) + \lim_{N\to\infty} \frac{3N_0}{2\pi\beta L}.$$

Donc $\lim_{N\to\infty} \langle l \rangle / N = 0$: la longueur moyenne des cycles n'est pas macroscopique dans ce système, pour $T > T_{\text{BEC}}^{\text{hom}}$.

3.3.2 Longueur moyenne des cycles en présence de condensat

Ce pargraphe traite le cas du gaz tridimensionnel homogène idéal, pour $T < T_{\text{BEC}}^{\text{hom}}$. Il y a un condensat de Bose–Einstein, et la suite montre que la longueur moyenne des cycles est macroscopique à la limite thermodynamique, et qu'elle s'exprime en fonction de la fraction condensée η_0 :

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\langle l \rangle}{N} = \frac{\eta_0^2}{2}. \tag{3.27}$$

Pour cela, l'expression de $\langle l \rangle$ se découpe en deux sommes :

$$\frac{\langle l \rangle}{N} = \frac{1}{N} \left(\sum_{k=1}^{L^{2+\epsilon}} k\pi_k + \sum_{k=L^{2+\epsilon}}^{N} k\pi_k \right). \tag{3.28}$$

Le premier terme est majoré à l'aide de la propriété de normalisation des π_k : $\sum_{k=1}^{N} \pi_k = 1$. $\forall k$ tel que $1 \leq k \leq L^{2+\epsilon}$ on a $\pi_k \leq k\pi_k \leq L^{2+\epsilon}\pi_k$, donc :

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{L^{2+\epsilon}} k\pi_k \leq \frac{L^{2+\epsilon}}{N} \sum_{k=1}^{L^{2+\epsilon}} \pi_k \leq \frac{L^{2+\epsilon}}{N} \to 0.$$

Le premier terme de la somme Eq. (3.28) ne donne donc pas de contribution macroscopique à la longueur moyenne des cycles. En revanche, le lemme suivant Eq. (3.29),

dont la démonstration de trouve en annexe (Appendix 8.1) permet de montrer que la contribution du deuxième terme est macroscopique.

$$\text{Lemme : Pour tout} \quad k \gg L^2 \quad \lim_{N\to\infty} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} = \mathbf{1}_{k\leq N_0}, \tag{3.29}$$

où $\mathbf{1}_{k\leq N_0}$ désigne la fonction caratéristique qui vaut 1 sur l'intervalle $[0, N_0[$ et 0 sur $[N_0, 1]$. D'après Eq. (3.9), $\lim_{N\to\infty} z_k = 1$ pour $k \gg L^2$, donc

$$\lim_{N\to\infty} k z_k \frac{Z_{N-k}}{Z_N} = k\mathbf{1}_{k\leq N_0}.$$

D'où

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{k=L^{2+\epsilon}}^{N} \frac{k z_k}{N^2} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^{N} k\mathbf{1}_{k\leq N_0} = \lim_{N\to\infty} \frac{(N_0 + L^{2+\epsilon})(N_0 - L^{2+\epsilon} + 1)}{2N^2} = \frac{\eta_0^2}{2}.$$

3.3.3 Conclusion

Pour le gaz idéal homogène à deux ou trois dimensions, l'existence d'un condensat de Bose-Einstein est équivalente au caractère macroscopique de la longueur moyenne des cycles.

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\langle l \rangle}{N} > 0 \qquad <=> \qquad \text{existence d'un condensat de Bose–Einstein} \tag{3.30}$$

Dans la démonstration de ce résultat, la présence d'un plateau dans la distribution des longueurs de cycles du gaz condensé est cruciale.

Or, dans le cas du gaz piégé, la distribution des longueurs de cycles présente aussi ce plateau pour le gaz condensé. De même, les simulations numériques [20] montrent que pour un système tridimensionnel piégé ou homogène, l'allure de la distribution des longueurs de cycle reste proche de celle du gaz idéal. C'est pourquoi le résultat Eq. (3.30) s'étend probablement aux systèmes piégés et aux systèmes avec des interactions faibles.

Dans [27], nous avons calculé la longueur moyenne du cycle le plus long $\langle l_{\max} \rangle$ dans un gaz idéal avec condensat de Bose–Einstein, et nous avons montré qu'elle est proportionnelle au nombre de bosons dans le condensat :

$$\langle l_{\max} \rangle \sim 0.624 N_0, \quad \text{c'est-à-dire} \quad \frac{\langle l_{\max} \rangle}{N} \sim 0.624 \eta_0 \tag{3.31}$$

Ce résultat donne un autre éclairage sur le lien entre condensat et cycles longs.

Pour des gaz en interaction, l'équivalence entre la condensation de Bose–Einstein et la présence de cycles infinis est mise en doute dans [23], par un contre-exemple qui décrit un cas où il y a des cycles infinis en l'absence de condensat.

La suite discute ce contre-exemple, et montre pourquoi je ne le trouve pas convaincant.

3.4 Cycles infinis sans condensat ?

Dans [23], Ueltschi présente l'exemple d'un cristal à température très basse, dans lequel il y aurait une densité non nulle de particules dans des cycles de longueur infinie, sans condensat de Bose-Einstein.

3.4.1 Un contre-exemple ?

La densité de particules dans des cycles de longueur k, pour un système fini à N particules est noté $\rho(k)$. ρ_∞ est la fraction de particules dans des cycles infinis. Cette fraction est définie de la manière suivante :

$$\rho_\infty = \rho - \sum_{k=1}^{\infty} \lim_{\text{thermo}} \rho(k),$$

où $\lim_{\text{thermo}}$ désigne la limite thermodynamique. Enfin, ρ est la densité totale de particules dans le système (j'ai posé $\rho = 1$ dans les calculs précédents). Ce qui est noté ici $\rho(k)$ correspond au π_k dans les notations de ma thèse.

L'auteur montre, par des arguments sur les trajectoires en temps imaginaire qui contribuent à la fonction de partition, que dans le cas d'un cristal toutes les particules appartiennent à des cycles de longueur infinie à la limite de la température nulle, c'est-à-dire :

$$\lim_{\beta\to\infty} \rho_\infty = \rho. \tag{3.32}$$

Il en déduit qu'il existe une température non nulle suffisamment basse pour laquelle $\rho_\infty > 0$. Or, dans le cas du cristal il affirme que la fraction condensée est nulle ($\rho_0 = 0$). Le cas du cristal constituerait donc un exemple où il y a une densité non nulle de particules dans les cycles infinis, sans fraction condensée. Il en conclut que condensat et cycles infinis ne sont en général pas équivalents.

3.4.2 Discussion

Il ne me semble pas qu'on puisse déduire de l'équation Eq. (3.32) qu'il existe une température finie pour laquelle la densité des particules dans les cycles infinis est non nulle.

En suivant les notations de [23], définissons la fonction $T \to \rho_\infty(T)$ de la manière suivante :

$$\rho_\infty(T) = \rho - \sum_{k=1}^{\infty} \lim_{\text{thermo}} \rho(k, T) \tag{3.33}$$

où $\rho(k, T)$ désigne la densité de particules dans des cycles de longueur k pour T fixée.

Pour le gaz sans interaction, cette fonction est continue en $T = 0$.

Continuité en $T = 0$, pour le gaz idéal tridimensionnel En effet, à température nulle $\pi_k = 1/N$, pour toute longueur de cycle k, donc $\rho(k, T = 0) = 1/N$, et

$$\forall k, \quad \lim_{\text{thermo}} \rho(k, T = 0) = 0.$$

Donc $\rho_\infty(T = 0) = \rho$. De plus, à température non nulle la limite thermodynamique de la distribution des longueurs de cycle est (Eq. (2.14)) :

$$\lim_{\text{thermo}} \rho(k, T) = \frac{z^k}{(2\pi\beta k)^{3/2}}.$$

donc

$$\lim_{T\to 0}\rho_\infty(T) = \rho - \lim_{T\to 0}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{z^k(k_BT)^{3/2}}{(2\pi k)^{3/2}} = \rho - \lim_{T\to 0}\frac{(k_BT)^{3/2}}{(2\pi)^{3/2}}g_{3/2}(z),$$

où $g_{3/2}(z) = \sum_{n=1}^{\infty} z^n/n^{3/2}$. La limite de la fugacité à température nulle vaut 1, et $g_{3/2}(1) = \zeta(3/2)$ est un réel, donc $\lim_{T\to 0}\rho_\infty(T) = \rho$. Pour le gaz idéal, la fonction ρ_∞ est donc continue en $T = 0$.

En revanche, la suite montre que pour un gaz en interaction faible, cette fonction est discontinue en $T = 0$. Dans le cas du cristal, où les bosons intéragissent fortement, il est probable que la fonction soit aussi discontinue en $T = 0$. Dans ce cas, on ne peut pas déduire de $\rho_\infty(T = 0) = \rho$ qu'il existe $T > 0$ telle que $\rho_\infty(T) > 0$. En effet, la densité des cycles infinis effectue éventuellement un saut de ρ à zéro entre $T = 0$ et $T > 0$. Bien que nous ne sachions pas démontrer qu'un tel saut existe, rien ne prouve qu'il n'existe pas.

3.4.3 Discontinuité en $T = 0$ de la fonction $\rho_\infty(T)$ pour un gaz homogène avec des intéractions faibles

$\rho_\infty(T)$ est continue en $T = 0$ si et seulement si quelque soit la suite t_p telle que $t_p \to 0$, on a

$$\lim_{p\infty}\rho_\infty(t_p) = \rho_\infty(0). \tag{3.34}$$

$\rho_\infty(0)$ est la densité de particules dans les cycles infinis à température nulle :

$$\rho_\infty(0) = \rho - \sum_{n=1}^{\infty}\lim_{th}\rho(n,0) = \rho - \sum_{n=1}^{\infty}\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N} = \rho - 0 = \rho. \tag{3.35}$$

Comme l'état fondamental de tout système à N particules est à symétrie bosonique, les permutations ont toutes le même poids et $\rho(n,0) = 1/N$ (voir Fig. 2.1 pour $\beta = 100$, c'est-à-dire $T \sim 0$).

J'évalue maintenant $\rho_\infty(t_p)$ pour t_p fini. La première partie de [23] montre, pour un gaz en interactions faibles, l'égalité $\rho_\infty(t_p) = \rho_0(t_p)$, où $\rho_0(t_p)$ désigne la fraction condensée à température t_p. Donc

$$\lim_{p\to\infty}\rho_\infty(t_p) = \lim_{p\to\infty}\rho_0(t_p). \tag{3.36}$$

Or, les interactions provoquent la déplétion du condensat, c'est-à-dire qu'à température nulle, la fraction condensée est strictement inférieure à 1 [28]. Donc $\rho_0(0) < \rho$, et $\lim_{p\to\infty}\rho_\infty(t_p) < \rho$. C'est pourquoi la condition Eq. (3.34) n'est pas vérifiée. La fonction ρ_∞ est donc discontinue en $T = 0$.

Dans cet exemple du cristal, il me semble que la densité de particules dans les cycles de longueur infinie est nulle à toute température non nulle. L'exemple éventuel d'un système avec une densité non nulle de particules dans des cycles de longueur infinie, mais pas de fraction condensée reste à trouver. Mais ma conjecture reste que la condensation de Bose-Einstein est équivalente à la présence de cycles infinis.

3.5 Conclusion

Dans cette partie, deux formules sont démontrées, qui donnent la fraction condensée en fonction de la distribution des longueurs de cycles, respectivement pour le gaz idéal homogène tridimensionnel, et pour le gaz idéal confiné dans un piège à deux ou trois dimensions. Ces formules montrent que la fraction condensée correspond à la somme des poids statistiques des cycles de longueur infinie, à la limite thermodynamique. Cette partie montre aussi que s'il existe un condensat de Bose-Einstein, la longueur moyenne des cycles est macroscopique .

Mon hypothèse est que ces résultats sont encore valables pour des gaz en intéraction. Les simulations numériques confirment cette hypothèse [20], et aucun contre-exemple ne permet pour l'instant de la mettre en doute.

Dans la suite de cette partie concerne la superfluidité des gaz de Bose. C'est un phénomène proche de la condensation de Bose-Einstein [29], qui a aussi une interprétation possible en terme de distribution des longueurs de cycles [17].

4

Superfluidité et cycles infinis

La superfluidité a été interprétée en 1938 par London [29] comme une conséquence de la condensation de Bose–Einstein. Les deux phénomènes sont en effet liés, du fait qu'ils concernent les mêmes types de systèmes (bosons à basse température), et qu'ils se traduisent tous les deux par des corrélations à longue portée. Cependant, il existe des systèmes pour lesquels la superfluidité apparaît en l'absence de condensation de Bose-Einstein. Il est donc clair que les deux phénomènes ne sont pas identiques.

Cette partie, traite d'abord le cas du gaz homogène tridimensionnel, pour lequel condensation de Bose–Einstein et superfluidité sont deux phénomènes équivalents à la limite thermodynamique, et liés à l'apparition de cycles de longueur infinie.

L'étude du gaz homogène bidimensionnel conduit à faire quelques conjectures sur la distribution des longueurs des cycles, ainsi que sur l'allure des trajectoires en temps imaginaire, pour un gaz de Bose avec interactions répulsives.

La longueur moyenne des cycles est un critère qui pourrait distinguer la condensation de Bose–Einstein de la superfluidité. En effet, la Section 3.3 montre que la condensation de Bose-Einstein est liée au caractère macroscopique de la longueur moyenne des cycles, alors que j'expose ici une conjecture qui associe la superfluidité à des cycles de longueur moyenne infinie, mais non macroscopique.

Cette conjecture, faite pour des systèmes homogènes, implique que la condensation de Bose–Einstein est une condition suffisante, mais non nécessaire à la superfluidité.

4.1 Superfluidité et cycles longs pour le gaz homogène tridimensionnel

La formule Eq. (1.15) donne la fraction superfluide à l'aide de la formulation en intégrale de chemin. Pour le gaz sans interaction on peut calculer explicitement la valeur moyenne du carré de l'indice des chemins. Ceci permet de comparer la fraction condensée et la fraction superfluide, pour se rendre compte qu'elles sont égales à la limite thermodynamique. Ce calcul montre que dans un gaz de Bose homogène tridimensionnel, la fraction superfluide est, comme la fraction condensée, donnée par le poids statistique des cycles de longueur supérieure à L^2, à la limite thermodynamique. Cette propriété se traduit par

le résultat :

$$\lim_{N\to\infty}\left(\frac{N_s}{N}-\sum_{k=L^2}^{N}\pi_k\right)=0 \quad \text{avec} \quad \frac{N_s}{N}=\frac{<W^2>L^2}{3\beta L^3}, \tag{4.1}$$

pour le gaz de Bose idéal homogène tridimensionnel, avec conditions aux limites périodiques, densité de particules η fixée à 1, et $\hbar = m = 1$.

4.1.1 Expression de la fraction superfluide en terme de longueurs de cycles

Dans le papier [20] la fraction superfluide d'un système bosonique est exprimée en fonction de l'indice des chemins W et de la distribution des longueurs de cycles :

$$<W^2>=\sum_{k=1}^{N}\frac{z_k}{k}\frac{Z_{N-k}}{Z_N}<w^2>_k, \tag{4.2}$$

avec

$$<w^2>_k= d\frac{\sum_{w=-\infty}^{\infty}\rho_{kw}w^2}{\sum_{w=-\infty}^{\infty}\rho_{kw}} \quad \text{et} \quad \rho_{kw}=\frac{L}{\sqrt{2\pi k\beta}}exp\left(-\frac{L^2w^2}{2k\beta}\right).$$

Pour un gaz tridimensionnel, la fraction superfluide s'exprime Eq. (1.15) :

$$\frac{\rho_s}{\rho}=\frac{<W^2>L^2}{3\beta L^3}=\frac{<W^2>}{3\beta L}.$$

Utiliser la statistique des cycles permet de montrer que dans la limite thermodynamique, la fraction condensée et la fraction superfluide sont les mêmes. Pour retrouver des notations similaires à celles de la partie précédente, je pose $\tilde{R}_k = L^2 < w^2 >_k /(3\beta k)$. Ainsi,

$$\frac{\rho_s}{\rho}=\sum_{k=1}^{N}\pi_k\tilde{R}_k \quad \text{avec} \quad \tilde{R}_k=\frac{2}{x}\frac{e^{-1/x}\partial_q\theta_3(0,e^{-1/x})}{\theta_3(0,e^{-1/x})} \quad \text{et} \quad x=\frac{k\lambda^2}{L^2}. \tag{4.3}$$

La fonction de coupure $\tilde{R}_k$ s'exprime à l'aide de la même fonction $\theta_3(u,q)$ introduite pour l'étude de la condensation de Bose–Einstein d'un gaz homogène tridimensionnel Section 3.1.

4.1.2 Démonstration du résultat Eq. (4.1)

Pour $x \to 0$ on a $\exp(-1/x) \to 0$. Or, comme θ_3 est analytique,

$$\frac{q}{\theta_3(0,q)}\frac{\partial\theta_3(0,q)}{\partial q}\sim_{q\to 0} 2q \quad \text{donc} \quad \tilde{R}_k\sim_{k\ll L^2} 4\frac{L^2}{2\beta k}e^{-L^2/(2\beta k)}.$$

Pour $x \to \infty$, on reconnait des sommes de Riemann au numérateur et au dénominateur, pour conclure :

$$\tilde{R}_k\sim_{k\gg L^2} 1.$$

$\tilde{R}_k$ vérifie les mêmes propriétés e à i que $R_k(\delta)$ (Section 3.1), la distribution des longueurs de cycles vérifie les propriétés a à d, et donc la même démonstration est valable. Donc :

$$\lim_{L\to\infty}\left(\sum_{k=1}^{N}\pi_k\tilde{R}_k-\sum_{k=L^2}^{N}\pi_k\right)=0.$$

Ainsi, à la limite thermodynamique, la fraction superfluide est donnée par la somme des probabilités d'avoir des cycles de longueur supérieure à L^2, comme la fraction condensée.

Conclusion

Dans cette géométrie, superfluidité, condensation de Bose–Einstein et existence de cycles de longueur infinie sont trois phénomènes équivalents à la limite thermodynamique. Cependant ce sont des quantités différentes pour des systèmes finis. En effet les fonctions de coupure R_k et $\tilde{R}_k$ associées respectivement à la fraction condensée et à la fraction superfluide sont différentes.

4.1.3 Système homogène tridimensionnel avec interactions

Dans la formulation en intégrale de chemin, les trajectoires en temps imaginaire sont des mouvements browniens pour le gaz sans interaction. Pour le gaz avec des interactions répulsives, la marche aléatoire n'est plus complètement libre. Les particules ne peuvent pas se trouver trop proches les unes des autres, donc la marche aléatoire se rapproche d'une marche aléatoire auto-évitante.

En trois dimensions, la marche aléatoire auto-évitante et la marche aléatoire normale ont la même loi de dispersion en racine du temps de parcours. Pour le gaz avec interactions répulsives, la distance moyenne parcourue par un cycle de longueur k est, comme pour le gaz idéal, de l'ordre de $\sqrt{k}\lambda$. C'est pourquoi l'allure de la fonction de coupure reste vraisemblablement inchangée lorsqu'on tient compte des interactions répulsives.

Si la distribution des longueurs de cycles n'est pas notablement modifiée par les interactions, la formule Eq. (4.3) montre que la fraction superfluide est encore donnée par la somme des probabilités d'avoir des cycles de longueur supérieure à L^2.

En revanche, en deux dimensions, le gaz homogène ne connaît pas de transition de Bose-Einstein alors que la transition superfluide est possible en présence d'interactions. Ces deux phénomènes ne sont donc pas équivalents.

4.2 Gaz homogène bidimensionnel

Le gaz de Bose idéal homogène bidimensionnel n'a pas de transition de Bose-Einstein, ni de transition superfluide, ni de cycles infinis. Cependant, des propriétés de cohérence subsistent, et le gaz en interactions répulsives a une transition de Kosterlitz-Thouless vers une phase superfluide. Dans ce système, les interactions changent profondément la nature des phases observées. Le gaz de Bose homogène bidimensionnel est donc un système interessant pour l'étude de l'influence des interactions sur la distribution des longueurs de cycles. Je ne présente pas de résultat rigoureux ici, mais simplement des conjectures.

4.2.1 Gaz idéal bidimensionnel

Comme il a été rappelé en Eq. (3.22), le nombre de saturation du gaz idéal homogène bidimensionnel est infini, et ce système n'a pas de transition de Bose-Einstein.

Pas de cycles infinis

L'étude de la distribution de la longueur des cycles a déjà montré précédemment que la longueur moyenne des cycles n'est pas macroscopique (Eq. (3.26)). La courbe (Fig. 4.1) montre la distribution des longueurs des cycles, calculée à l'aide de la formule de Landsberg Eq. (2.1). La décroissance des coefficients π_k est exponentielle pour des grands systèmes. Les effets de taille finie sont importants pour le gaz bidimensionnel. À la limite thermodynamique, la distribution des longueurs de cycles est $\pi_k \sim z^k/(2\pi\beta k)$, où z est la fugacité calculée en annexe (Appendix 8.4).

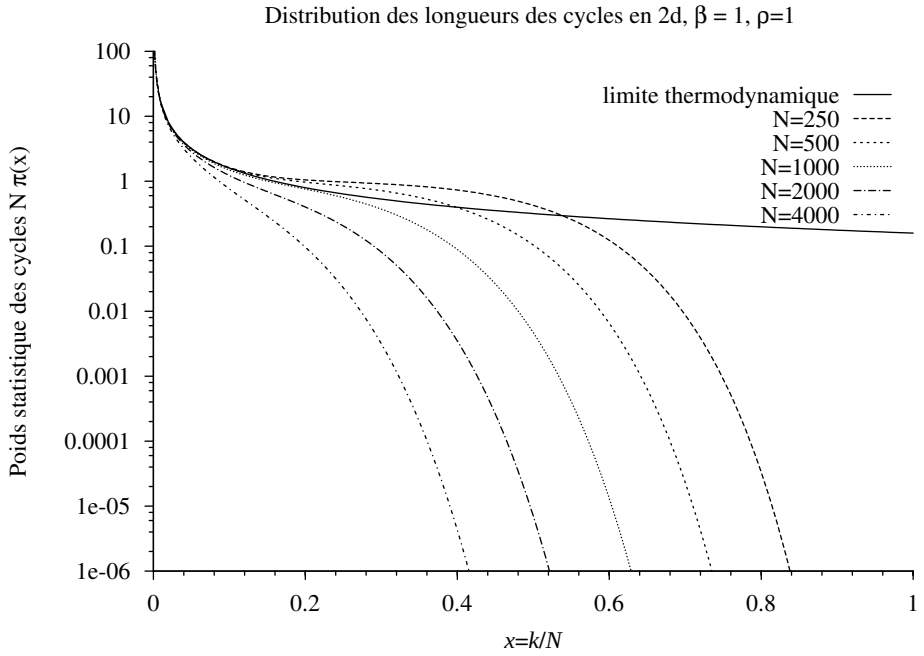


FIG. 4.1 – Distributions des longueurs de cycles pour le gaz homogène bidimensionnel sans interaction.

Connaissant la distribution des longueurs de cycles, on peut en conclure qu'il n'existe pas de cycles de longueurs infinie au sens de Eq. (3.2) dans le gaz idéal bidimensionnel. En effet, la propriété de normalisation des π_k reste valable pour $N \to \infty$, donc :

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{N} \pi_k = 1.$$

Cependant,

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lim_{\text{thermo}} \pi_k = \sum_{k=1}^{\infty} z^k/(2\pi\beta k) = -\frac{\ln(1-z)}{2\pi\beta}$$

Or, l'annexe (Appendix 8.4) montre que $z = 1 - e^{-2\pi\beta}$ pour un gaz de densité égale à 1. Donc

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lim_{\text{thermo}} \pi_k = 1.$$

La densité de particules dans les cycles de longueur infinie est donc nulle pour le gaz homogène idéal bidimensionnel.

Pas de superfluide

Dans le cas d'un gaz homogène bidimensionnel, de densité surfacique $\eta = 1$, la formule de Pollock et Ceperley Eq. (1.15) donne la fraction superfluide (pour $\hbar = m = 1$) :

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \frac{\langle W^2 \rangle}{2\beta}. \tag{4.4}$$

L'existence d'un superfuide est donc équivalente à la non-nullité de la valeur moyenne du carré de l'indice des chemins. Or, pour avoir un indice non nul, un chemin doit parcourir au moins la distance L. Pour le gaz idéal, les chemins imaginaires sont des trajectoires browniennes, donc leur dispersion est en racine carrée du temps imaginaire. Pour qu'un cycle donne une contribution non nulle à la valeur moyenne du carré de l'indice, sa longueur doit être supérieure ou égale à L^2. Connaissant la décroissance exponentielle de la distribution des longueurs de cycles pour le gaz idéal, il est clair que la fraction superfluide est nulle.

Conclusion

Le gaz idéal homogène bidimensionnel n'a pas de transition superfluide, pas de transition de Bose–Einstein, et pas de cycle de longueur infinie. En revanche, si on tient compte des interactions il existe une transition de Kosterlitz-Thouless vers une phase superfluide.

4.2.2 Gaz homogène bidimensionnel avec intéractions répulsives

Ce paragraphe expose nos hypothèses sur l'allure possible de la distribution des cycles, qui traduirait une transition superfluide sans condensation de Bose-Einstein.

Le gaz homogène bidimensionnel en interaction connaît une transition de Kosterlitz-Thouless. Au-dessus de la température de transition, le gaz est normal, et le quasi-ordre à longue portée est détruit par la prolifération de vortex libres. En dessous de la transition, les vortex marchent par paires, et il existe un quasi-ordre à longue portée dans le système, c'est-à-dire que les corrélations décroissent algébriquement [35]. Voyons quelle distribution des longueurs de cycles pourrait traduire ce quasi-ordre à longue portée.

Effet des interactions répulsives sur la fonction de coupure $\tilde{R}_k$

Tenir compte des interactions répulsives entre les atomes interdit de considérer les trajectoires en temps imaginaire comme des marches aléatoires normales. En effet à cause de la répulsion entre atomes, les trajectoires en temps imaginaire se rapprochent des marches

aléatoires auto-évitantes. Or en deux dimensions, l'extansion typique d'une marche aléatoire auto-évitante n'est plus en racine du temps de parcours mais en une puissance γ du temps de parcours, avec $1/2 < \gamma < 1$ [31] (plus précisément $\gamma = 3/4$ [32]). Ainsi, pour un gaz bidimensionnel avec interactions répulsives, un cycle de longueur k parcourt une distance typique $(2\pi\beta k)^\gamma$ supérieure à la distance typique parcourue dans le cas idéal. C'est pourquoi l'allure de la fonction de coupure $\tilde{R}_k$ doit être modifiée. Ma conjecture est :

$$\tilde{R}_k^{2d,\mathrm{int}} \sim 0 \quad \text{pour} \quad k \ll L^{1/\gamma} \quad \text{et} \quad \tilde{R}_k^{2d,\mathrm{int}} \sim (2\pi k\beta)^{2\gamma}/L^2 \quad \text{pour} \quad k \gg L^{1/\gamma}. \quad (4.5)$$

Si la distribution des longueurs de cycles reste la même que pour le cas idéal, et que la fonction de coupure est Eq. (4.5), alors la formule Eq. (4.4) donne une fraction superfluide nulle, comme pour le gaz idéal. En effet, la fraction superfluide est :

$$\frac{\eta_s}{\eta} = \sum_{k=1}^{L^2} \pi_k \tilde{R}_k^{2d,\mathrm{int}} \sim \sum_{k\gg L^{1/\gamma}}^{L^2} z^k \frac{(2\pi\beta k)^{(2\gamma)}}{2\pi\beta k} \frac{1}{L^2} \sim \frac{(2\pi\beta)^{(2\gamma-1)}}{L^2} \sum_{k=1}^{L^2} z^k k^{(2\gamma-1)}.$$

$2\gamma - 1 < 1$, donc la somme est majorée par la série $\sum_{k=1}^{\infty} z^k k$ qui converge vers $z/(1-z)^2$. La fraction superfluide est donc nulle à toute température non nulle.

En supposant que l'expression de $\langle W^2 \rangle$ en fonction de la distribution des cycles Eq. (4.2) reste valable pour le gaz en interaction, il faut tenir compte de l'effet des interactions non seulement sur la fonction de coupure, mais aussi sur la distribution des longueurs de cycles afin d'obtenir une fraction superfluide non nulle.

Effet des interactions repulsives sur la distribution des longueurs de cycles

Voici un argument qualitatif, expliquant pourquoi les interactions répulsives favorisent les longs cycles au détriment des petits cycles.

Les cycles courts, par exemple de longueur 2 ou 3 correspondent à des trajectoires en temps imaginaires pour lesquelles les particules doivent être très proches les unes des autres. Or, les interactions répulsives rendent cette proximité peu probable.

En revanche, un long cycle traversant éventuellement les limites périodiques du système, peut être composé de particules qui restent à distance constante les unes des autres au cours du temps imaginaire. C'est pourquoi les interactions repulsives, en basse dimension, favorisent les grands cycles au détriment des petits cycles.

Conjecture sur la distribution des longueurs de cycles Dans le chapitre précédant, il a été montré que la condensation de Bose-Einstein est caractérisée par l'existence d'un palier dans la distribution des longueurs des cycles. Ainsi, pour k supérieur à une certaine valeur qui dépend du système considéré, et $k < N_0$, $N\pi_k \sim 1$. La condensation de Bose-Einstein est aussi caractérisée par le fait que $\lim_{|x-x'|\to\infty} \rho^{(1)}(x, x', \beta) =$ constante > 0.

Pour les systèmes en phase normale, $\rho^{(1)}(x, x', \beta)$ décroît exponentiellement en fonction de la distance $|x - x'|$. Ceci est accompagné par une décroissance exponentielle du poids statistique des cycles longs : $N\pi_k \sim z^k/(2\pi\beta k)$, avec $z < 1$.

Par analogie, puisque la superfluidité en dimension deux est caractérisée par la décroissance algébrique des corrélations $\rho^{(1)}(x, x', \beta)$ en fonction de la distance $|x - x'|$, je propose une distribution des longueurs de cycles en :

$$N\pi_k \propto 1/k^\alpha \quad \text{pour } k \text{ grand.} \tag{4.6}$$

La distribution des cycles pour k petit doit être adaptée afin que la condition de normalisation soit remplie. Voyons les conséquences de cette hypothèse.

La formule Eq. (4.2), avec la fonction de coupure $\tilde{R}_k^{2d,\text{int}}$ (Eq. (4.5)) et l'hypothèse Eq. (4.6) donne la valeur suivante de la moyenne du carré de l'indice des chemins :

$$\left\langle W^2 \right\rangle \sim \frac{(2\pi\beta)^{2\gamma}}{L^4} \frac{1}{2\gamma - \alpha + 1} (L^{2(2\gamma-\alpha+1)} - L^{(2\gamma-\alpha+1)/\gamma}).$$

Pour la valeur particulière $\alpha = 2\gamma - 1$, ces hypothèses donneraient une fraction superfluide

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \frac{(2\pi\beta)^{2\gamma}}{2} \frac{1}{2\beta\eta'},$$

finie et non nulle.

Cette distribution des longueurs de cycles donne une longueur moyenne des cycles infinie, mais pas macroscopique. En effet $\langle l \rangle \sim N^{1-\alpha} = N^{2(1-\gamma)} \to \infty$, et $\langle l \rangle / N \sim N^{1-2\gamma} \to 0$ car $1 < 2\gamma < 2$.

Ceci coïncide avec l'idée que la condensation de Bose-Einstein est équivalente au caractère macroscopique de la longueur moyenne des cycles, alors qu'une longueur moyenne des cycles infinie, mais non macroscopique suffirait à donner lieu à la superfluidité. Alors que la différence n'est pas visible en trois dimensions, les systèmes bidimensionnels permettent de distinguer les phénomènes de condensation de Bose-Einstein et de superfluidité.

La distribution donnée ici est une hypothèse sans justification, mais qui donnnerait des résultats corrects. Il faudrait maintenant calculer numériquement la distribution des longueurs de cycles pour le gaz homogène bidimensionnel en interaction, afin de vraiment comprendre ce qu'il se passe, et de voir si cette hypothèse est crédible ou non.

Conclusion

Cette partie montre que le paramètre d'ordre de la condensation de Bose-Einstein donné par Penrose et Onsager est équivalent à l'existence de cycles de longueur infinie, pour des systèmes sans interaction. Des arguments en faveur de la généralisation de ce résultat aux systèmes en interaction ont également été présentés.

La condensation de Bose–Einstein est équivalente au caractère macroscopique de la longueur moyenne des cycles, c'est-à-dire proportionnelle au nombre N de bosons dans le système, pour les gaz homogènes idéaux. Cette relation est vraisemblablement correcte en général. La superfluidité dans un système homogène tridimensionnel requiert également une longueur moyenne des cycles macroscopique. En revanche, pour le gaz bidimensionnel en interaction répulsive, la superfluidité correspondrait à une longueur moyenne des cycles infinie, mais non proportionnelle à N .

L'étude du gaz de Bose bidimensionnel homogène demande à être approfondie. Des simulations numériques seraient utiles pour comprendre comment la statistique des cycles est modifiée par les interactions. Il manque encore une démonstration rigoureuse de l'équivalence entre l'existence de cycles infinis et la condensation de Bose-Einstein pour des gaz en interactions.

Dans la suite, nous nous sommes intéressés aux propriétés du gaz bidimensionnel avec interactions répulsives dans un piège. Les propriétés de ce gaz sont différentes de celles du gaz homogène, donc cette étude n'a pas donné d'éclairage sur les conjectures Eq. (4.5) et Eq. (4.6). En revanche, tout ce travail sur la statistique des longueurs de cycles a trouvé une application pour l'étude du gaz quasi-bidimensionnel, en lien avec les expériences actuelles.

Deuxième partie

Gaz de Bose dans un piège quasi-bidimensionnel

Introduction

Les propriétés des transitions de phase sont conditionnées par la dimensionalité des systèmes physiques étudiés. Dans des systèmes unidimensionnels ou bidimensionnels, la densité d'état est modifiée par rapport aux systèmes tridimensionnels, et les fluctuations thermiques détruisent l'ordre à longue portée. Alors qu'il existe une transition de Bose-Einstein à température non nulle pour un gaz bosonique homogène tridimensionnel, cette transition est absente en dimension un ou deux, pour des systèmes homogènes. En effet, d'après le théorème de Hohenberg [34], la condensation de Bose-Einstein est impossible dans un gaz homogène bidimensionnel, avec ou sans interaction. Les fluctuations thermiques détruisent l'ordre à longue portée dans les systèmes de basse dimension. Cependant, des propriétés de cohérence du gaz peuvent subsister. Les fluctuations thermiques ne détruisent pas la superfluidité dans le gaz de Bose uniforme bidimensionnel en interaction répulsive. On peut alors observer une transition de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) vers une phase superfluide [35], caractérisée par un quasi-ordre à longue portée (décroissance algébrique des corrélations).

Les gaz de Bose en basse dimension suscitent actuellement un grand intérêt auprès de expérimentateurs et des théoriciens. Des expériences étudient les gaz quantiques en deux dimensions ([6], [39]), où des transitions de phase caractérisées par l'apparition de phénomènes de cohérence sont observées. Les gaz de Bose unidimensionnels présentent des propriétés différentes des gaz en deux ou trois dimensions ([37], [38]). Pour comprendre les expériences, il faut tenir compte de plusieurs effets qui se conjuguent, dont voici une liste non exhaustive.

- Des effets dûs à la réduction de la dimensionalité, comme la disparition du condensat de Bose-Einstein dans un gaz uniforme, si on passe de la dimension trois à la dimension deux.
- Dans certaines expériences, les atomes sont piégés. La densité d'état d'un gaz piégé est différente de celle d'un gaz homogène de même dimension, donc l'existence d'un condensat de Bose-Einstein est conditionnée par la géométrie du système. Par exemple, alors que le gaz idéal homogène bidimensionnel n'a pas de transition de Bose-Einstein, le gaz idéal bidimensionnel piégé condense à température non nulle. De plus, le fait de confiner les atomes dans un piège modifie la densité atomique : elle n'est plus uniforme, comme dans le cas du gaz homogène. Dans le cas du gaz

bidimensionnel piégé, la densité au centre du piège diverge pour une température inférieure à la température de transition de Bose-Einstein. Le théorème de Hohenberg n'est alors plus applicable.
- Les expériences mettent en jeu des atomes en interaction, la théorie doit donc tenir compte des conséquences physiques des interactions. Par exemple, des interactions répulsives dans un gaz de Bose confiné dans un piège bidimensionnel détruisent le condensat, puisqu'elles empêchent la divergence de la densité de particules au centre du piège [36]. En revanche, les interactions répulsives dans un gaz de Bose bidimensionnel homogène ne détruisent pas la superfluidité.
- Enfin, lors d'une comparaison entre la théorie et l'expérience, les effets de taille finie inhérents aux systèmes réels peuvent être significatifs.

Nous avons tout d'abord mis en place un modèle simple permettant de tenir compte du fait que les systèmes expérimentaux ne sont pas exactement bidimensionnels. Puis, nous avons ajouté à ce modèle l'effet des interactions, grâce à une théorie de champ moyen.

Cette partie commence par une présentation du contexte expérimental actuel de l'étude du gaz de Bose bidimensionnel piégé. Vient ensuite une étude du gaz sans interaction dans un piège quasi-bidimensionnel. Cette étude souligne l'importance de tenir compte de l'épaisseur du système réel, même si elle est très faible. Le dernier chapitre présente notre théorie de champ moyen, et compare les prédictions de notre méthode avec celles de deux autres théories, et avec les résultats des simulations Monte Carlo quantiques.

5

Gaz de Bose bidimensionnel : contexte expérimental

Après quelques rappels sur la théorie du gaz de Bose bidimensionnel, avec ou sans interaction, ce chapitre présente deux expériences actuelles sur les gaz d'atomes froids, concernant des bosons dans un piège bidimensionnel. La première a lieu au Laboratoire Kastler Brossel (LKB), et met en jeu des atomes de Rubidium. La seconde se déroule au NIST, avec des atomes de Sodium. Ces expériences cherchent à identifier les phases du nuage atomique bidimensionnel, pour des températures proches de la température de dégénérescence.

5.1 La théorie des gaz bidimensionnels piégés

5.1.1 Gaz de Bose homogène bidimensionnel

Comme il a été rappelé en première partie, il n'existe pas de transition de Bose-Einstein pour le gaz idéal bidimensionnel homogène, car le nombre de saturation associé à ce système est infini. Cependant, des propriétés de cohérence subsistent dans ce système, et en présence d'interactions répulsives, il existe une transition de Kosterlitz-Thouless vers une phase superfluide. Au-dessus de la température de transition T_{BKT}, le gaz est dans une phase normale. Il contient des vortex isolés, qui détruisent la cohérence. En revanche, pour $T < T_{\mathrm{BKT}}$, les vortex s'assemblent sous forme de paires vortex/antivortex, et un quasi-ordre à longue portée s'installe dans le gaz [35].

5.1.2 Gaz idéal dans un piège harmonique bidimensionnel isotrope

Contrairement au gaz de Bose idéal uniforme, le gaz de Bose idéal dans un piège harmonique a une température non nulle de transition de Bose-Einstein. En effet, le nombre de saturation est fini pour le gaz dans un piège isotrope :

$$N_{\mathrm{sat}}^{2d} = \frac{\pi^2}{6}\frac{1}{(\hbar\omega N)^2}, \quad \text{et donc} \quad k_B T_{BEC}^{2d} = \frac{\sqrt{6N}}{\pi}\hbar\omega. \tag{5.1}$$

Si le piège n'est pas isotrope, on doit remplacer dans les formules la pulsation ω par la moyenne géométrique $\sqrt{\omega_x\omega_y}$ des pulsations dans les directions x et y.

L'étude du gaz de Bose idéal dans un piège harmonique, en terme de statistique des cycles (Section 3.2.3) a montré que pour $T < T_{\mathrm{BEC}}^{2d}$, la fraction condensée est égale, à la limite thermodynamique, à la somme des poids statistiques des cycles de taille supérieure à $\sqrt{N}$.

Une particularité du gaz de Bose idéal dans un piège harmonique bidimensionnel est la divergence de la densité de particules au centre du piège, dans la phase condensée. En effet, une approche semi-classique permet de calculer la densité de bosons dans le piège à la limite thermodynamique, lorsque les niveaux d'énergie sont faiblement espacés :

$$n(r)\lambda^2 = -\ln(1 - e^{\beta(\mu - m\omega^2 r^2/2)}). \tag{5.2}$$

S'il y a condensation de Bose-Einstein le potentiel chimique tend vers zéro à la limite thermodynamique. Alors la densité de bosons au centre du piège devient infinie. Cette caractéristique n'est plus vraie en trois dimensions. Le fait que la densité diverge au centre du piège rend inapplicable le théorème de Hohenberg pour le gaz piégé.

5.1.3 Gaz avec interactions répulsives, dans un piège harmonique bidimensionnel

Les interactions répulsives régularisent la densité de bosons au centre du piège. C'est pourquoi elles détruisent le condensat [36]. En revanche, une transition de Kosterlitz-Thouless est encore possible, et mène à un gaz superfluide.

5.2 Les expériences en deux dimensions

Une méthode pour explorer la physique du gaz de Bose bidimensionnel consiste à construire un piège en forme de crêpe : la taille du piège selon l'une des trois directions de l'espace est très petite devant la taille du piège selon les autres dimensions. Pour un piège harmonique écrasé selon l'axe vertical, cela se traduit par $\hbar\omega_z \gg \hbar\omega_x$ et $\hbar\omega_z \gg \hbar\omega_y$. Le système peut être considéré comme purement bidimensionnel lorsque les conditions $k_B T \ll \hbar\omega_z$ et $\mu \ll \hbar\omega_z$ sont remplies. Dans ce cas, le mouvement d'un atome selon l'axe vertical $0z$ est gelé dans l'état fondamental gaussien de l'oscillateur harmonique.

5.2.1 Expérience du LKB [6]

Dans cette expérience, deux nuages quasi-bidimensionnels sont créés à partir d'un gaz piégé tridimensionnel d'atomes de Rubidium 87 . En faisant interférer les deux nuages, des informations sur la cohérence et les fluctuations de phases de ces systèmes sont accessibles. Cette expérience a permis d'observer la transition de Kosterlitz Thouless pour le gaz piégé quasi-bidimensionnel.

Déroulement de l'expérience

Création de deux nuages quasi-bidimensionnels de Rubidium 87 Un gaz dégénéré tridimensionnel d'atomes de Rubidium 87 est créé par évaporation radio-fréquence dans un piège magnétique à symétrie cylindrique. Un réseau optique de pas $d = 3\mu m$ est

utilisé pour séparer le gaz piégé tridimensionnel en deux nuages indépendants, et pour les compresser dans un régime bidimensionnel. Le réseau optique est formé par l'intersection de deux faisceaux laser de longueur d'onde 532 nm.

Les deux nuages ainsi obtenus sont confinés dans le plan $x-y$ par un piège magnétique de pulsations ω_x et ω_y. Les nuages sont parallèles, presque bidimensionnels, et allongés dans la direction y. Les fréquences de piégeage sont : $\omega_x/(2\pi) = 11Hz$, $\omega_y/(2\pi) = 130Hz$ et $\omega_z/(2\pi) = 3.6kHz$ [6].

Le nombre total d'atomes par plan est $N \sim 10^5$. Les nuages ont une extension spatiale de $120\mu m$ et $10\mu m$ dans les directions x et y.

Ensuite, les deux nuages vont interférer. Pour pouvoir tirer de l'interférence des informations thermodynamiques, il faut au préalable que les nuages soient à la même température. La thermalisation est assurée par les atomes de haute énergie : ceux-ci peuvent voyager presque librement entre les deux nuages.

Interférences entre les deux nuages Lorsque les nuages sont à la même température (c'est-à-dire 200 ms après la fin du découpage du nuage tridimensionnel initial), les potentiels de confinement sont subitement supprimés. Alors, les deux nuages entrent en expansion, surtout dans la direction z. Lorsqu'ils se recouvrent, une figure d'interférence en trois dimensions apparaît. Après 20 ms de temps de vol, la projection de la figure d'interférence est enregistrée par une caméra CCD à l'aide de l'absorption d'un laser sonde résonnant.

Quantités observées

Le contraste des franges d'interférence donne des informations sur la cohérence locale dans les nuages bidimensionnels : plus le contraste est fort, plus la cohérence est forte. Les fluctuations de phase, qui se traduisent par l'ondulation des franges d'interférence, renseignent sur la cohérence à longue portée. À basse température, le contraste est élevé, et les fluctuations de phase sont faibles, donc les franges sont rectilignes. Lorsque la température augmente le contraste diminue et les franges ondulent de plus en plus. Cette expérience met en évidence le « quasi-ordre à longue portée », c'est-à-dire la décroissance algébrique des corrélations.

Comme il y a deux nuages superposés dans cette expérience, il n'est pas possible de détecter les vortex simplement comme des trous de densité. En revanche, comme un vortex est aussi associé à un défaut de phase, les figures d'interférence peuvent rendre compte de la présence de vortex. Cette expérience met en évidence des dislocations dans les figures d'interférence à haute température. Ces dislocations sont la signature de la présence de vortex libres dans le gaz, au-dessus de la température de transition. En revanche, une paire vortex-antivortex suffisamment proches l'un de l'autre ne provoque pas de dislocation sur la figure d'interférence.

Ces expériences donnent aussi accès au profil de densité du nuage atomique. Au-dessous de la température de transition, le profil de densité observé est bien représenté par la somme d'une gaussienne (atomes dans la phase normale) et d'une parabole inversée (profil de Thomas Fermi correspondant à la phase superfluide). En revanche, au-dessus de la température de transition le profil a l'allure d'une gaussienne. Nous verrons dans la suite (Section 6.4) qu'il ne s'agit pas strictement d'une gaussienne, mais d'une combinaison

linéaire de gaussiennes. L'apparition du pic de densité représenté par la parabole inversée, signature de la transition superfluide, est appelée « apparition de la bimodalité ».

Afin de préciser la nature de la transition dans cette expérience, Krüger et al. calculent dans [7] le nombre critique d'atomes à la transition de deux manières : la transition est définie soit par l'apparition des franges d'interférence, soit par l'apparition de la bimodalité dans le profil de densité du gaz. Les deux méthodes donnent les mêmes nombres critiques.

5.2.2 Expérience du NIST Cladé et.al. [39]

Cette expérience explore la transition superfluide d'un gaz de Bose quasi-bidimensionnel piégé.

Des atomes de Sodium sont confinés dans un seul piège horizontal, quasi-bidimensionnel. Le profil de densité est mesuré après un temps de vol, ainsi que la longueur de cohérence. Avant d'atteindre la transition superfluide, le gaz passe par une phase normale fortement corrélée, pour laquelle la densité de particules vérifie $n\lambda^2 > 1$, sans pour autant atteindre la densité critique de la transition superfluide.

Déroulement de l'expérience

Les atomes sont d'abord confinés dans un piège magnétique et refroidis par évaporation radio-fréquence. Avant d'atteindre la condensation de Bose-Einstein, les atomes sont transférés adiabatiquement vers un piège optique dipolaire horizontal, quasi-bidimensionnel. Après $5s$ d'évaporation dans le piège dipolaire, la profondeur du piège est réduite pendant $1s$, puis le refroidissement par évaporation se poursuit pendant $5s$. Le nuage atomique ainsi obtenu est approximativement un disque. Les valeurs typiques des fréquences de piégeage sont $\omega_z/(2\pi) = 1kHz$ et $\omega_x/(2\pi) \sim \omega_y/(2\pi) = 18Hz$.

Le profil de densité bidimensionnel du nuage est obtenu par imagerie par absorption selon la direction verticale, après avoir supprimé le potentiel de confinement et attendu pendant le temps de vol.

Comparaison avec les paramètres [6]

Le dispositif expérimental du NIST diffère de celui du LKB par deux aspects :
- L'intensité de l'interaction entre les atomes de Sodium est 6.5 fois plus faible que l'interaction entre les atomes de Rubidium du LKB.
- La géométrie du piège dans le plan radial est isotrope.

Quantités observées

Les images obtenues par absorption après quelques ms de temps de vol mettent en évidence l'éventuelle bimodalité du profil, ainsi que les fluctuations de densité. Ces fluctuations de densité n'apparaissent qu'après le temps de vol et reflètent les fluctuations de phase dans le nuage quasi-bidimensionnel.

Sur les profils de densité réalisés à température suffisamment basse pour qu'apparaisse la bimodalité, la largeur du pic (partie non gaussienne du profil) est mesurée. D'après [39],

lorsque cette largeur passe par un minimum, la superfluidité apparaît dans le système. C'est ainsi qu'est mesurée la température de transition superfluide.

En plus de l'observation des profils de densité, cette expérience permet de mesurer la cohérence du nuage atomique, jusqu'à une échelle de longueur de l'ordre de la longueur de de Broglie, en observant les interférences entre deux copies du nuage.

5.3 Questions soulevées par les expériences

Dans l'expérience du LKB, une transition est observée entre une phase normale, et une phase cohérente. Le nombre de saturation mesuré expérimentalement est environ cinq fois plus grand que le nombre de saturation prédit théoriquement pour le piège bidimensionnel correspondant. La température de transition de l'expérience est donc significativement plus faible que la température de transition théorique.

Dans cette expérience, ainsi que dans les simulations Monte Carlo correspondantes [8], le profil de densité observé est loin du modèle d'un gaz bidimensionnel piégé avec intéraction de champ moyen correspondant Fig. 5.1.

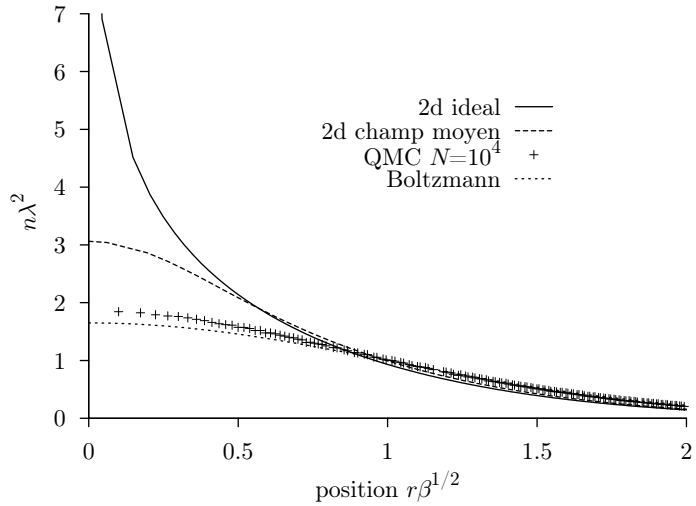


FIG. 5.1 – Profil de densité pour le gaz bidimensionnel idéal, avec intéractions de champ moyen, et simulations Monte Carlo quantiques [8], pour une température $T = T^{2d}_{\mathrm{BEC}}$. Le profil de densité de la simulation numérique, qui est en accord avec l'expérience, s'approche plus du gaz de Boltzmann que du gaz de bosons bidimensionnel avec interaction de champ moyen. À la température considérée le système n'est donc pas dégénéré : les bosons se comportent presque comme des particules discernables.

Ainsi, les résultats expérimentaux ne s'accordent pas avec le modèle bidimensionnel idéal, ni avec le modèle bidimensionnel avec intéraction de champ moyen. Des hypothèses suggéraient que la théorie de champ moyen n'était pas suffisante pour rendre compte de l'influence des interactions sur le système. Nous avons proposé une explication qui tient compte de la troisième dimension.

5.3.1 Phases observées dans la région de transition

Pour le gaz quasi-bidimensionnel, la transition superfluide a lieu pour une densité critique élevée (Section 7.4). Ainsi, la dégénérescence du gaz est atteinte bien avant la transition superfluide. L'étude du gaz au voisinage de la transition superfluide nécessite donc de tenir compte des effets quantiques dûs à la dégénérescence du gaz. La théorie de champ moyen ne suffit pas à rendre de compte de la physique au voisinage de la transition.

6 Gaz idéal piégé quasi-bidimensionnel

Afin de comprendre les observations expérimentales, et les résultats des simulations numériques, nous avons commencé par l'étude du gaz de Bose idéal dans la géométrie donnée par les expériences.

Dans la continuité de la première partie de ma thèse, nous nous sommes intéressés à la distribution des longueurs de cycles pour les bosons sans interaction, dans un piège harmonique bidimensionnel. La comparaison de la distribution des longueurs de cycles de ce système, avec la distribution obtenue par les simulations Monte Carlo quantiques [8] confirme que le gaz idéal bidimensionnel n'est pas le modèle adéquat pour décrire les expériences et les simulations numériques (Fig. 6.2).

Nous avons défini les lois d'échelle régissant le piège harmonique quasi-bidimensionnel, ainsi que sa limite thermodynamique. Dans cette géométrie, nous avons calculé la distribution des longueurs de cycles pour le gaz idéal, ainsi que la température de transition de Bose-Einstein et les profils de densité.

Les lois d'échelle que nous proposons pour décrire les nuages atomiques des expériences du LKB et du NIST ([6] et [39]) tiennent compte de l'excitation thermique résiduelle des atomes selon l'axe de fort confinement. Grâce à ce modèle, nous expliquons en grande partie pourquoi les températures de transition observées dans [7] sont plus basses que celles attendues pour un gaz strictement bidimensionnel.

6.1 Définition du piège quasi-bidimensionnel

Entre le piège tridimensionnel et le piège bidimensionnel isotropes, on peut construire toutes formes de pièges anisotropes, pour lesquels le confinement dans une des trois directions de l'espace (par exemple z) est plus fort que dans les deux autres (Fig. 6.1). Le cas bidimensionnel correspond à un confinement infini selon l'axe vertical.

6.1.1 Loi d'échelle du piège quasi-bidimensionnel

Nous avons défini dans [40] le piège quasi-bidimensionnel de la manière suivante :

$$\hbar\omega_x = \hbar\omega_y = \hbar\omega \quad \text{et} \quad \hbar\omega_z = \hbar\omega\sqrt{N}\tilde{\omega}_z\frac{\sqrt{6}}{\pi} = \tilde{\omega}_z k_B T_{\mathrm{BEC}}^{2d}, \tag{6.1}$$

où $\tilde{\omega}_z$ est un coefficient sans dimension, N désigne le nombre de particules dans le piège, et T_{BEC}^{2d} est la température de transition pour le gaz idéal bidimensionnel : $k_B T_{\mathrm{BEC}}^{2d} = \hbar\omega\sqrt{6N}/\pi$.

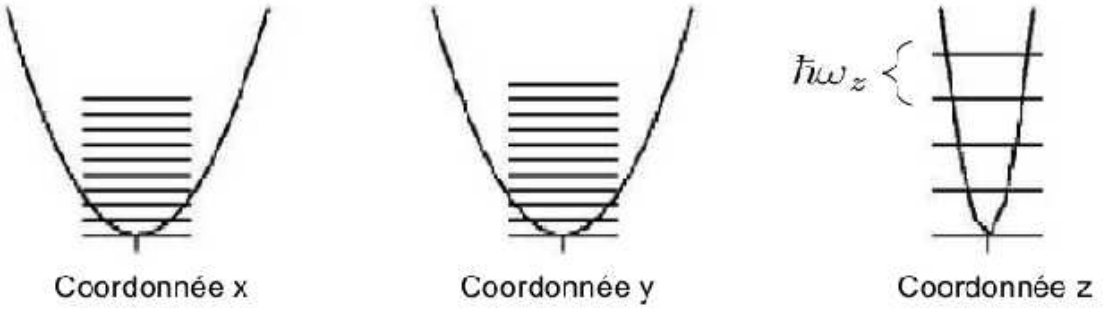


FIG. 6.1 – Piège quasi-bidimensionnel. Dans les directions x et y, le confinement est faible, et les niveaux d'énergie sont très proches les uns des autres (espacés de $\hbar\omega$). En revanche, dans la direction verticale le confinement est beaucoup plus fort, et les niveaux d'énergie sont fortement espacés. Si $k_B T \ll \hbar\omega_z$, on peut négliger l'occupation des niveaux excités en z (cas strictement bidimensionnel).

6.1.2 Limite thermodynamique

Lorsqu'on passe à la limite thermodynamique, le nombre de particules $N \to \infty$, et le piège se dilate de manière à garder $(\hbar\omega_x)(\hbar\omega_y)(\hbar\omega_z)N = \alpha^3$ constant, où α a la dimension d'une énergie. Ici, en utilisant les équations Eq. (6.1) cette condition s'exprime :

$$(\hbar\omega)^3\sqrt{N}\tilde{\omega}_z\frac{\sqrt{6}}{\pi}N = \alpha^3 \quad \text{c'est-à-dire} \quad \hbar\omega = \left(\frac{\pi}{\tilde{\omega}_z\sqrt{6}}\right)^{1/3}\frac{\alpha}{\sqrt{N}} = \frac{\delta}{\sqrt{N}}. \tag{6.2}$$

A un coefficient près ($\delta = (\frac{\pi}{\tilde{\omega}_z\sqrt{6}})^{1/3}\alpha$), cette condition est la même que pour le cas bidimensionnel isotrope (Section 3.2.1). La limite thermodynamique du piège tridimensionnel isotrope est caractérisée par la la condition $\hbar\omega \sim N^{-1/3}$. Ainsi, à la limite thermodynamique le piège quasi-bidimensionnel est infini suivant les directions x et y alors qu'il reste fini suivant la direction verticale.

6.1.3 Notations et définitions des variables réduites

Du fait de la forte anisotropie du piège, la variable z est traitée différemment des variables x et y. Le vecteur position dans l'espace R^3 est noté $\vec{r} = (\mathbf{r}, z)$ avec $\mathbf{r} = (x, y)$ et $r = |\mathbf{r}|$.

Bien que la température de transition de Bose-Einstein du gaz quasi-bidimensionnel soit différente de celle du gaz purement bidimensionnel, la température de transition T_{BEC}^{2d}

donne l'échelle de grandeur de la température de transition de Bose-Einstein du gaz quasi-bidimensionnel sans interaction, ainsi que de la température de transition superfluide. C'est pourquoi nous utilisons les variables réduites définies dans la suite, qui se réfèrent toutes au système bidimensionnel idéal :

- $t = T/T_{\mathrm{BEC}}^{2d}$ est la température réduite, elle est reliée à la température inverse β par $\beta = \pi/(\sqrt{6N}(\hbar\omega t))$.
- $l_z = \sqrt{\hbar/(m\omega_z)}$ est l'extension typique du nuage atomique dans la direction verticale.
- $\tilde{\omega}_z = \hbar\omega_z/(k_B T_{BEC}^{2d}) = (\lambda/l_z)^2 t/(2\pi)$ est la pulsation réduite du piège, dans la direction verticale.
- $\hbar\omega_z\beta = \tilde{\omega}_z/t$.
- $\tilde{\mu} = \beta\mu$ est le potentiel chimique réduit.
- $\tilde{r} = \sqrt{m\omega^2}\sqrt{\beta}r$.
- $\tilde{z} = z/l_z$.

Le régime quasi-bidimensionnel diffère du régime bidimensionnel par le fait que les degrés de liberté dans la direction verticale confinée ne sont pas complètement gelés : l'excitation des niveaux d'énergie selon z ne peut pas être négligée. Dans ce régime, la température est de l'ordre de l'espacement des niveaux d'énergie selon z : $k_B T \sim \hbar\omega_z$. C'est pourquoi $\hbar\omega_z$ reste une fraction fixe de T_{BEC}^{2d} à la limite thermodynamique.

6.2 Distribution des longueurs des cycles

Dans la continuité de la première partie de ma thèse, nous avons calculé la distribution des longueurs de cycles pour un gaz de Bose idéal, dans la géométrie définie au-dessus. Ce calcul nous a permis de mettre en évidence le fait qu'en terme de longueur de cycle, les résultats des simulations Monte Carlo quantiques pour le gaz quasi-bidimensionnel en interaction sont très proches des résultats obtenus pour un gaz sans interaction, dans la géométrie adaptée.

Pour le gaz idéal, la formule de Landsberg Eq. (2.1) permet de calculer récursivement la distribution des longueurs des cycles π_k à partir de la fonction de partition pour une seule particule dans le système à température inverse $k\beta$, z_k. Dans le piège quasi bidimensionnel, le même calcul qu'en Section 3.2.3 donne, en tenant compte de la condition Eq. (6.2) :

$$z_k^{q2d} = \frac{1}{(1-e^{-k\beta\hbar\omega})^2}\frac{1}{1-e^{-k\beta\hbar\omega_z}} = \frac{1}{(1-e^{-k\beta\delta/\sqrt{N}})^2}\frac{1}{1-e^{-k\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi}} \tag{6.3}$$

À la limite $N \to \infty$, la valeur asymptotique de la fonction de partition z_k^{q2d} dépend de la position de k par rapport à $\sqrt{N}$.

$$\text{Si} \quad k\beta\hbar\omega \ll 1 \quad \text{c'est-à-dire} \quad k \ll \sqrt{N} \quad \text{alors} \quad z_k \sim \frac{N}{(k\beta\delta)^2}\frac{1}{1-e^{-k\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi}}$$

$$\text{Si} \quad k\beta\hbar\omega \gg 1 \quad \text{c'est-à-dire} \quad k \gg \sqrt{N} \quad \text{alors} \quad z_k \sim 1.$$

D'après le travail effectué dans la première partie de ma thèse, la distribution des

longueurs de cycles est donnée par :

$$\begin{aligned}
&\text{Si} \quad k\beta\hbar\omega \ll 1 \quad \text{c'est-à-dire} \quad k \ll \sqrt{N} \quad \text{alors} \quad \pi_k^{q2d} \sim \frac{1}{(k\beta\delta)^2} \frac{1}{1 - e^{-k\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi}}. \\
&\text{Si} \quad k\beta\hbar\omega \gg 1 \quad \text{c'est-à-dire} \quad k \gg \sqrt{N} \quad \text{alors} \quad \pi_k^{q2d} \sim \frac{1}{N}\mathbf{1}_{k\leq N_0}.
\end{aligned} \tag{6.4}$$

Pour le système quasi-bidimensionnel, la coupure entre les deux régimes se fait comme en deux dimensions, pour $k \sim \sqrt{N}$. Pour $k \ll \sqrt{N}$, le facteur correctif par rapport au cas bidimensionnel est $1/(1-\exp(-k\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi))$. Lorsque k devient grand, ce facteur tend vers 1 et donc la distribution des cycles du système quasi-bidimensionnel est très proche de celle du système bidimensionnel. En revanche, pour k petit, ce facteur fait croître z_k^{q2d} par rapport à z_k^{2d}. C'est pourquoi pour une température donnée, le poids statistique des petits cycles est plus grand dans le gaz quasi-bidimensionnel que dans le gaz purement bidimensionnel. Comme il a été vu dans la première partie de ma thèse, le condensat de Bose-Einstein correspond aux longs cycles. À température identique, le système bidimensionnel est donc plus condensé que le système quasi-bidimensionnel. Ceci explique qualitativement que la température de transition observée expérimentalement soit plus petite que celle du gaz idéal bidimensionnel, c'est-à-dire que la température réduite de transition de Bose-Einstein, pour le système quasi-bidimensionnel vérifie : $t_{\mathrm{BEC}}^{q2d} < 1$. (Fig. 6.2).

Le calcul de la distribution des longueurs de cycles a permis de démontrer le théorème suivant en annexe (Appendix 8.3) :

$$\text{Théorème :} \quad \lim_{N\to\infty} \left(\frac{N_0}{N} - \sum_{k=\sqrt{N}}^{N} \pi_k \right) = 0. \tag{6.5}$$

Ce théorème montre que la fraction condensée dans un gaz piégé quasi-bidimensionnel est égale, comme pour le gaz bidimensionnel, à la somme des poids statistiques des cycles de longueur supérieure à $\sqrt{N}$, à la limite thermodynamique.

6.3 Température de transition de Bose–Einstein

Les remarques qualitatives précédentes montrent que la distribution des longueurs de cycles dépend du confinement selon l'axe vertical. La température de transition de Bose-Einstein dépend donc aussi de ce confinement. Voici le calcul du nombre de saturation et de la température de transition d'un gaz de Bose, adapté au système piégé quasi-bidimensionnel. Dans ce calcul, nous avons tenu compte de l'occupation des niveaux excités en z, même si les nombres d'occupation sont très faibles lorsque $\omega_z \gg \omega$.

6.3.1 Nombre moyen de bosons excités dans le piège

Pour un gaz de Bose dans un potentiel harmonique de pulsations $\omega_x = \omega_y = \omega$ et $\omega_z = \omega\tilde{\omega}_z\sqrt{6N}/\pi$, les niveaux d'énergie sont :

$$\epsilon_{n_x,n_y,n_z} = \hbar(\omega(n_x + n_y + 1) + \omega_z(n_z + 1/2)).$$

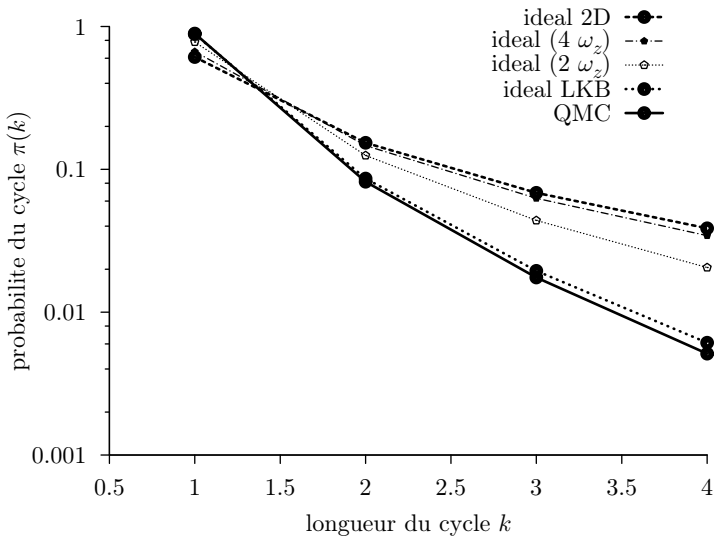


FIG. 6.2 – Distribution des longueurs des petits cycles pour différentes géométries du piège. Ce calcul est effectué à la température critique du gaz bidimensionnel idéal, c'est-à-dire $t = 1$. Plus la pulsation ω_z augmente, plus les cycles de longueur supérieure à 1 deviennent probables. La géométrie de l'expérience du LKB [6] correspond à $\tilde{\omega}_z = 0.55$. Pour ce piège à $t = 1$, le gaz idéal ne présente presque que des cycles de longueur 1 alors que dans le gaz idéal bidimensionnel à même température, le poids statistique des cycles de longueur supérieure à 1 n'est pas négligeable. La distribution des cycles pour le gaz idéal dans cette géométrie diffère peu de la distribution des cycles donnée par la simulation Monte Carlo, qui tient compte des interactions. Cette figure indique que pour le gaz idéal, la température de transition de Bose-Einstein est de plus en plus faible lorsque la géométrie du système s'écarte du piège purement bidimensionnel, en prenant de l'épaisseur.

Après avoir translaté l'origine des énergies à zéro, le nombre moyen de bosons dans le système s'écrit, dans l'ensemble grand canonique, en fonction du potentiel chimique μ :

$$\begin{aligned}\langle N(\mu)\rangle &= \sum_{n_x,n_y,n_z=0}^{\infty} \frac{1}{\exp(\beta(\hbar(\omega(n_x+n_y)+\omega_z n_z)-\mu))-1} \\ &= \sum_{n_z=0}^{\infty}\sum_{p=0}^{\infty} \frac{p+1}{\exp(\beta(\hbar(\omega p+\omega_z n_z)-\mu))-1}.\end{aligned}$$

La deuxième somme est obtenue par le changement d'indice $p = n_x + n_y$ et $n_x = p - n_y$. Le nombre moyen de bosons dans le fondamental ($\langle N_0\rangle = 1/(\exp(-\beta\mu)-1)$) se sépare du reste de la somme :

$$\langle N(\mu)\rangle = \langle N_0\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{p+1}{\exp(\beta(\hbar\omega p-\mu))-1} + \sum_{n_z=1}^{\infty}\sum_{p=0}^{\infty} \frac{p+1}{\exp(\beta(\hbar(\omega p+\omega_z n_z)-\mu))-1}.$$

Le nombre moyen de bosons dans les états excités s'écrit $\langle N_{exc}(\mu)\rangle = \langle N(\mu)\rangle - \langle N_0\rangle$.

À la limite thermodynamique, $\hbar\omega\beta \to 0$, donc les séries peuvent être approximées par des intégrales. Le nombre moyen de bosons dans les états excités est donc :

$$\begin{aligned}\langle N_{\rm exc}\rangle(\mu) &\sim \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2}\int_0^{\infty}\frac{u\,du}{\exp(u-\beta\mu))-1} + \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2}\sum_{n_z=1}^{\infty}\int_0^{\infty}\frac{u\,du}{\exp(u+\beta(\hbar\omega_z n_z-\mu))-1} \\ &\sim \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2}\sum_{n_z=0}^{\infty}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{\exp(-p\beta(\hbar\omega_z n_z-\mu))}{p^2}. \qquad (6.6)\end{aligned}$$

6.3.2 Nombre de saturation et température critique

La limite pour $\mu \to 0$ du nombre moyen de bosons excités donne le nombre de saturation $N_{\rm sat}^{q2d}$:

$$N_{\rm sat}^{q2d} = \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2}\sum_{n_z=0}^{\infty} F_2(\beta\hbar n_z\omega_z) \quad \text{avec} \quad F_2(x) = \sum_{p=1}^{\infty}\frac{e^{-px}}{p^2}. \qquad (6.7)$$

Pour le système bidimensionnel, le nombre de saturation est donné par le premier terme de la somme Eq. (6.7). Le nombre de saturation est donc plus grand pour le système quasi-bidimensionnel que pour le système bidimensionnel. La température critique $T_{\rm BEC}^{q2d}$ est donnée en résolvant l'équation $N_{\rm sat}^{q2d} = N$. Comme le nombre de saturation est une fonction croissante de la température, la température de transition du gaz quasi-bidimensionnel est plus faible que celle du gaz bidimensionnel.

En faisant appel aux variables réduites (Section 6.1.3), l'équation à résoudre se réécrit :

$$\frac{6t^2}{\pi^2}\sum_{n=0}^{\infty} F_2\left(\frac{n\tilde{\omega}_z}{t}\right) = 1. \qquad (6.8)$$

La courbe de la température de transition de Bose-Einstein en fonction du confinement du nuage atomique selon l'axe vertical est obtenue par résolution numérique de cette équation (Fig. 6.3). En particulier, pour l'expérience du LKB, $\tilde{\omega}_z = 0.55$, et la température de transition vaut $t_{\rm BEC}^{q2d} = 0.78$, et pour l'expérience du NIST, $\tilde{\omega}_z = 0.5$ et $t_{\rm BEC}^{q2d} = 0.76$.

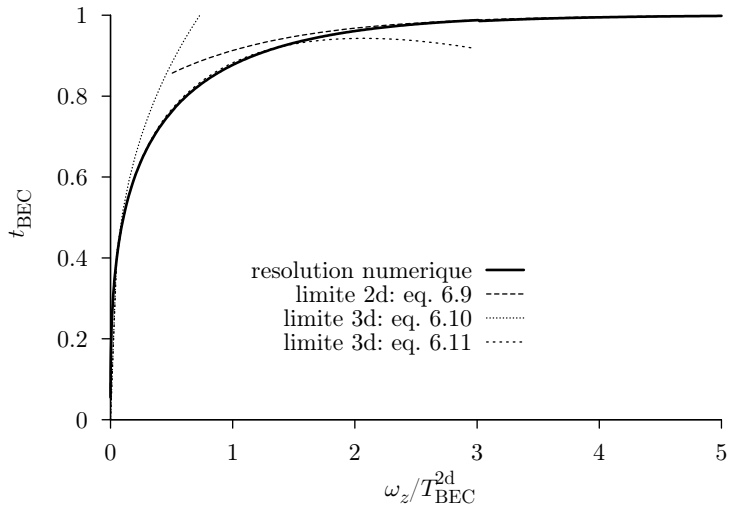


FIG. 6.3 – Température de transition de Bose-Einstein pour le gaz de Bose idéal dans un piège quasi-bidimensionnel. La courbe en trait plein est obtenue en résolvant numériquement l'équation Eq. (6.8). Les courbes en pointillés correspondent aux expressions asymptotiques de la température de transition en fonction de $\tilde{\omega}_z$. Pour $\tilde{\omega}_z$ petit, le système s'approche d'un piège tridimensionnel (d'après [40]).

6.3.3 Cas limites

Les cas $\tilde{\omega}_z \gg 1$ ou $\tilde{\omega}_z \ll 1$ correspondent aux limites des systèmes respectivement bidimensionnel et tridimensionnel, en utilisant des approximations de l'équation Eq. (6.8) pour les valeurs extrêmes de $\tilde{\omega}_z$.

Limite du gaz bidimensionnel : $\tilde{\omega}_z \gg 1$

Dans l'équation Eq. (6.8), les termes en $\exp(-p\tilde{\omega}_z/t)$ avec $p > 1$ peuvent être négligés. La nouvelle équation est donc :

$$t^2\left(1+\frac{e^{-\tilde{\omega}_z/t}}{\zeta(2)}\right)\sim 1.$$

La limite pour $\tilde{\omega}_z \to \infty$ donne $t^2 = 1$, c'est-à-dire qu'on retrouve la température de transition du gaz bidimensionnel lorsque le confinement selon l'axe vertical est infini.

La correction à apporter à la température de transition pour $\tilde{\omega}_z$ grand est donnée par l'exponentielle ayant le plus petit argument de la série. Soit $t = 1-\epsilon$: pour $\epsilon \to 0$,

$$(1-\epsilon)^2\left(1+\frac{e^{-\tilde{\omega}_z/(1-\epsilon)}}{\zeta(2)}\right)\sim(1-2\epsilon)\left(1+\frac{e^{-\tilde{\omega}_z(1+\epsilon)}}{\zeta(2)}\right)\sim 1.$$

L'équation finale $\epsilon e^{\tilde{\omega}_z\epsilon}\sim e^{-\tilde{\omega}_z}/(2\zeta(2))$ qui donne pour ϵ très petit $\epsilon\sim e^{-\tilde{\omega}_z}/(2\zeta(2))$. Donc la température de transition pour le gaz quasi-bidimensionnel est :

$$t_{\mathrm{BEC}}(\tilde{\omega}_z) = 1-\frac{e^{-\tilde{\omega}_z}}{2\zeta(2)}. \tag{6.9}$$

Limite du gaz tridimensionnel : $\tilde{\omega}_z \ll 1$

La limite $\tilde{\omega}_z \to 0$ correspond au gaz tridimensionnel. En effet, en reconnaissant dans l'équation Eq. (6.8) une somme de Riemann, qui peut être approximée par une intégrale pour $\tilde{\omega}_z$ petit, on obtient :

$$\sum_{n_z=0}^{\infty} F_2(n_z\tilde{\omega}_z/t) \sim \frac{t}{\tilde{\omega}_z}\int_0^{\infty} F_2(w)dw = \frac{t}{\tilde{\omega}_z}\zeta(3).$$

La température de transition est donnée par :

$$t = \left(\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)}\right)^{1/3}\tilde{\omega}_z^{1/3}. \tag{6.10}$$

En revenant aux vraies variables, avec $\tilde{\omega}_z = \pi/(\sqrt{6N})$ cette formule donne la température de transition pour un gaz idéal dans un piège harmonique tridimensionnel isotrope : $k_B T_{\mathrm{BEC}}^{3d} = \hbar\omega(N/\zeta(3))^{1/3}$.

Le calcul suivant détermine la correction par rapport au système tridimensionnel, pour $\tilde{\omega}_z$ petit. Pour x petit :

$$\sum_{n=0}^{\infty} F_2(nx) \sim \frac{1}{x}\zeta(3) + \frac{1}{2}\zeta(2).$$

Ainsi la température de transition pour $\tilde{\omega}_z$ faible est donnée en résolvant l'équation :

$$\frac{t^2}{\zeta(2)}\left(\frac{t}{\tilde{\omega}_z}\zeta(3) + \frac{1}{2}\zeta(2)\right) = 1.$$

Il s'agit de résoudre une équation polynomiale de degré 3. Le changement de variable suivant : $x = t + \tilde{\omega}_z\zeta(2)/(6\zeta(3))$ permet d'écrire l'équation à résoudre sous la forme suivante :

$$x^3 - \frac{1}{12}\tilde{\omega}_z^2(\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)})^2 x + \frac{1}{27}\frac{\tilde{\omega}_z^3}{8}(\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)})^3 - \tilde{\omega}_z\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} = 0.$$

En ne gardant que les termes d'ordre 1 en $\tilde{\omega}_z$, l'équation se simplifie : $x^3 - \tilde{\omega}_z\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} = 0$. La solution est : $x = (\tilde{\omega}_z\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)})^{1/3}$, donc

$$t_{\mathrm{BEC}} \sim \left(\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)}\right)^{1/3}\tilde{\omega}_z^{1/3} - \frac{1}{6}\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)}\tilde{\omega}_z. \tag{6.11}$$

6.3.4 Conclusion

Pour les paramètres de l'expérience du LKB, comme pour l'expérience du NIST, l'effet de la géométrie du piège est donc tout-à-fait significatif. Tenir compte de l'occupation des niveaux excités selon z explique partiellement l'abaissement de la température de transition observée par rapport au cas bidimensionnel. Dans le cadre de ce modèle quasi-bidimensionnel du gaz idéal piégé nous avons calculé le profil de densité du nuage atomique.

6.4 Profil de densité

Les expériences donnent accès au profil de densité du gaz de bosons dans le piège, c'est-à-dire à la quantité $n(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dz \quad n_{3d}(\mathbf{r}, z)$, où $n_{3d}(\mathbf{r}, z)$ désigne la densité de particules au point x, y, z. La quantité qui nous intéresse ici n'est donc pas exactement la densité de bosons en un point du piège, mais l'intégrale de cette densité sur l'axe vertical. Comme le confinement est le même selon les coordonnées x et y, le profil de densité ne dépend que de la distance r au centre du piège ($r = \sqrt{x^2 + y^2}$). Pour $T > T_{\mathrm{BEC}}^{q2d}$, il n'y a pas de condensat de Bose-Einstein, et le profil de densité est calculé de manière semi-classique, en tenant compte de l'excitation des niveaux d'énergie selon l'axe vertical. Pour $T < T_{\mathrm{BEC}}^{q2d}$, il est possible de calculer le profil de densité à partir de la distribution des longueurs de cycles.

6.4.1 Profil de densité en l'absence de condensat

Pour une température T telle que $k_B T \sim \hbar\omega_z$, le mouvement des bosons peut être traité de manière classique pour les coordonnées x et y et les moments k_x et k_y. En revanche, selon l'axe des z un traitement quantique est nécessaire, et les niveaux d'énergie sont $\nu\hbar\omega_z$ avec ν entier. Pour chaque niveau d'énergie $\nu\hbar\omega_z$, le nombre de bosons par élément de volume $dxdydk_xdk_y$ de l'espace des phases est [41] :

$$dN = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{dxdydk_xdk_y}{\exp[\beta(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + v(r) + \nu\hbar\omega_z - \mu)] - 1}, \tag{6.12}$$

avec $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, et $v(r) = m\omega^2 r^2/2$ pour le gaz sans interaction. La densité de particules au point (x, y) ne dépend que de la distance $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ au centre du piège, et s'obtient en intégrant Eq. (6.12) sur les moments k_x et k_y, et en sommant sur tous les niveaux d'énergie ν :

$$n(r) = -\frac{1}{\lambda^2} \sum_{\nu=0}^{\infty} \ln(1 - e^{\beta(\mu - v(r) - \nu\hbar\omega_z)}). \tag{6.13}$$

Le calcul explicite de $n(r)$ nécessite l'évaluation du potentiel chimique μ. Pour un nombre de bosons N fixé, le potentiel chimique est déterminé grâce à la condition :

$$N = \int d^2\mathbf{r} \quad n(r) = \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr \quad rn(r) = -\frac{\pi}{\lambda^2} \sum_{\nu=0}^{\infty} \int_0^\infty d(r^2) \ln(1 - e^{\beta(\mu - v(r) - \nu\hbar\omega_z)}).$$

L'intégration sur la variable r^2 redonne l'équation Eq. (6.6), qui avait été obtenue en prenant la limite thermodynamique pour le système quasi-bidimensionnel, à partir d'un traitement quantique dans toutes les directions :

$$N = \frac{T^2}{\hbar^2\omega^2} \sum_{\nu=0}^{\infty} F_2(-\beta\mu + \nu\beta\hbar\omega_z).$$

En passant aux variables réduites, l'équation donnant le potentiel chimique réduit $\tilde{\mu} = \beta\mu$ s'écrit :

$$\frac{6t^2}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} F_2\left(-\tilde{\mu} + \frac{n\tilde{\omega}_z}{t}\right) = 1. \tag{6.14}$$

Pour une température réduite t et une pulsation de confinement vertical réduite $\tilde{\omega}_z$ fixées, la résolution numérique de cette équation donne accès au potentiel chimique réduit $\tilde{\mu}$. Connaissant $\tilde{\mu}$, on reporte sa valeur dans Eq. (6.13) pour obtenir le profil de densité $n(r)$ (Fig. 6.4).

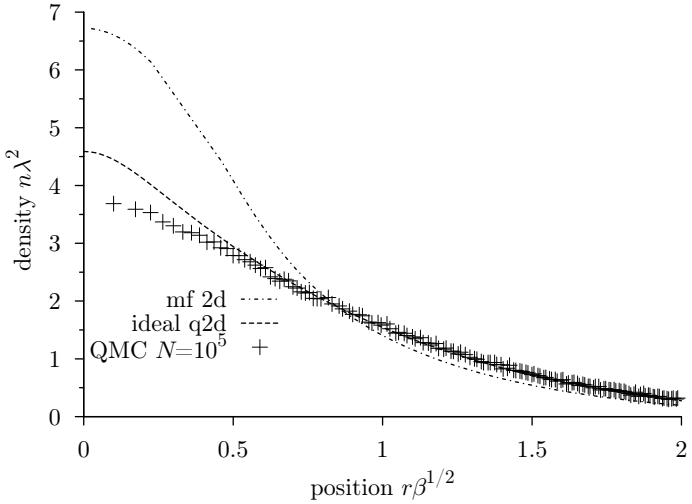


FIG. 6.4 – Profil de densité pour $t = 0.8$. Les résultats des simulations Monte Carlo quantiques sont approchés de manière satisfaisante par la théorie quasi-bidimensionnelle sans intéraction Eq. (6.13) et Eq. (6.14). A cette température, le gaz idéal quasi-bidimensionnel avec $\tilde{\omega}_z = 0.55$ n'est pas condensé (selon [40]).

Si le potentiel d'interaction peut être exprimé uniquement en fonction de la variable r, cette méthode est encore valable pour le gaz en interaction. C'est ce que nous avons utilisé dans notre étude de ce système avec notre méthode du champ moyen (voir Section 7.2.4).

6.4.2 Profil de densité en présence de condensat

Ce calcul est effectué dans l'ensemble canonique, en faisant appel au formalisme de la première partie de ma thèse. Pour le gaz idéal, la distribution des longueurs de cycles apparaît dans l'expression du profil de densité. Le profil de densité est une combinaison linéaire de gaussiennes, dont la variance dépend de la longueur des cycles.

En présence de condensat, le potentiel chimique s'annule, et l'équation Eq. (6.13) donne la densité de particules dans les états excités, et non la densité totale de particules. Pour obtenir le profil de densité, deux contributions se distinguent : $n_{\rm exc}(r)$ est la densité de particules excitées, et $n_0(r)$ est la densité de particules condensées. Ici, il s'agit de densités surfaciques : l'intégrale sur la coordonnée axiale z a été réalisée.

La densité de bosons en un point de l'espace est le coefficient diagonal de la matrice

densité réduite à une particule. Donc la densité surfacique est :

$$n(r) = \int dz \quad n_{3d}(\mathbf{r}, z) = \int dz \quad \rho^{(1)}(\mathbf{r}, z; \mathbf{r}, z; \beta) = \sum_{k=1}^{N} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \int dz \quad \rho_1^{q2d}(\mathbf{r}, z; \mathbf{r}; k\beta)$$
$$= N \sum_{k=1}^{N} \pi_k^{q2d} \frac{\rho_1^{2d}(r, r, k\beta)}{z_k^{2d}}. \tag{6.15}$$

D'après Eq. (3.17), le coefficient diagonal de la matrice densité à une seule particule pour le gaz bidimensionnel piégé s'écrit :

$$\rho_1^{2d}(r, r, \beta) = \frac{m\omega}{\pi\hbar} \frac{1}{1 - e^{-2\hbar\omega\beta}} \exp(-r^2 \frac{m\omega}{\hbar} \tanh(\frac{\hbar\omega\beta}{2}))$$

et d'après Eq. (3.18), la matrice densité pour une seule particule, à température inverse $k\beta$ s'écrit

$$z_k^{2d} = \frac{1}{(1 - \exp(-k\beta\hbar\omega))^2}.$$

Ainsi le profil de densité est donné par :

$$n(r) = N \frac{m\omega}{\pi\hbar} \sum_{k=1}^{N} \pi_k^{q2d} \tanh(\frac{\hbar\omega k\beta}{2}) \exp(-r^2 \frac{m\omega}{\hbar} \tanh(\frac{\hbar\omega k\beta}{2})). \tag{6.16}$$

La suite montre que pour une température inférieure à la température de transition T_{BEC}^{q2d}, à la limite thermodynamique, le profil de densité Eq. (6.15) se décompose en deux termes : la contribution des longs cycles dans l'équation Eq. (6.15) donne le profil de densité du condensat de Bose-Einstein, alors que la contribution des petits cycles donne le profil de densité des particules excitées. Ceci est conforme au théorème Eq. (6.5) démontré en annexe.

Contribution des petits cycles

La condition Eq. (6.2), ainsi que les comportements asymptotiques de z_k^{2d} et ρ_1^{2d} (Section 3.2.3), et l'expression Eq. (6.4) de la distribution des longueurs de cycles permettent de simplifier l'expression de la contribution des petits cycles au profil de densité. En effet, pour $k \ll \sqrt{N}$,

$$\pi_k^{q2d} \frac{\rho_1^{2d}(r, r, k\beta)}{z_k^{2d}} \sim \frac{1}{(k\beta\delta)^2} \frac{1}{1 - e^{-k\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi}} \frac{m}{\hbar^2} \frac{k\beta\delta^2}{2\pi N} e^{-r^2 \frac{m}{\hbar^2} k\beta\delta^2/N},$$

c'est-à-dire

$$N\pi_k^{q2d} \frac{\rho_1^{2d}(r, r, k\beta)}{z_k^{2d}} \sim \frac{1}{\lambda_{dB}^2} \frac{1}{k} \frac{e^{-r^2 \frac{m}{\hbar^2} k\beta\delta^2/N}}{1 - e^{-k\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi}}.$$

En remplaçant par les vraies variables, la contribution des petits cycles au profil de densité est donc :

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{\sqrt{N}} \pi_k^{q2d} \frac{\rho_1^{2d}(r, r, k\beta)}{z_k^{2d}} = \frac{1}{\lambda^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-k\beta m\omega^2 r^2/2}}{k(1 - e^{-k\beta\hbar\omega_z})} = \frac{1}{\lambda^2} \sum_{\nu=0}^{\infty} \ln(1 - e^{-\beta(v(r) - \nu\hbar\omega_z)}).$$

Le membre de droite de cette équation est obtenu en développant le terme $1/(1-\exp(-k\beta\hbar\omega_z))$ en série, en intervertissant l'ordre des sommes, et en reconnaissant le développement en série du logarithme. Cette dernière formule donne exactement la densité surfacique de bosons dans les états excités $n_{\rm exc}(r) = \lim_{\mu\to 0} n(r)$, obtenue à partir de l'équation Eq. (6.13). Ceci confirme que les petits cycles (c'est-à-dire de longueur inférieure à $\sqrt{N}$) correspondent aux particules excitées.

Contribution des longs cycles

La contribution des longs cycles au profil de densité est évaluée à partir des résultats concernant le gaz idéal bidimensionnel (Section 3.2.3) et de l'expression du poids statistique des longs cycles pour le gaz quasi-bidimensionnel Eq. (6.4) :

$$\text{pour} \quad k \gg \sqrt{N}, \quad \frac{\rho_1^{2d}(r,r,k\beta)}{z_k^{2d}} \sim \frac{m}{\hbar^2}\frac{\delta}{\pi\sqrt{N}} e^{-r^2\frac{m}{\hbar^2}\delta\sqrt{N}} \quad \text{et} \quad \pi_k^{q2d} \sim \frac{1}{N}\mathbf{1}_{k\le N_0},$$

donc

$$\begin{aligned}\sum_{k=\sqrt{N}}^{N} \pi_k^{q2d}\frac{\rho_1^{2d}(r,r,k\beta)}{z_k^{2d}} &\sim_{N\to\infty} \frac{m\delta}{\pi\hbar^2}\sqrt{N}\frac{N_0}{N}e^{-r^2\frac{m}{\hbar^2}\frac{\delta}{\sqrt{N}}} \\ &\sim_{N\to\infty} N_0\frac{m\omega}{\pi\hbar}e^{-r^2\frac{m\omega}{\hbar}} = N_0|\psi_0(r)|^2.\end{aligned}$$

Ainsi, la contribution des cycles de longueur supérieure à $\sqrt{N}$ est égale, à la limite thermodynamique, à la densité surfacique des particules condensées.

Ces résultats coïncident avec le théorème Eq. (6.5) démontré en annexe (Appendix 8.3). En effet, la fraction condensée correspond au poids statistique des cycles de longueur infinie, alors que les particules excitées correspondent au poids statistique des petits cycles.

6.5 Conclusion

En négligeant les interactions, notre modèle qui tient compte des niveaux excités selon l'axe vertical donne une bonne approche de l'expérience et des simulations numériques.

Nous introduisons ensuite les interactions en gardant la géométrie de notre modèle.

7

Gaz piégé quasi-bidimensionnel avec interactions

L'étude du gaz de Bose idéal dans un piège quasi-bidimensionnel a montré qu'il est nécessaire de tenir compte de l'excitation thermique résiduelle des atomes dans les niveaux d'énergie de la direction confinée, pour les paramètres des expériences en cours. Nous avons proposé une méthode de champ moyen dans [40] qui tient compte du caractère quasi-bidimensionnel du gaz. Deux autres méthodes similaires ont suivi dans [42] et [43].

La théorie de champ moyen ne permet pas de prévoir la transition superfluide. En revanche, elle est suffisante pour calculer les profils de densité du gaz atomique au-dessus de la température superfluide. À partir des profils de densité, nous définissons la température de transition comme la température pour laquelle la densité au centre du piège atteint la densité critique de la transition superfluide [46]. Cette approximation, dite « LDA »(Local Density Approximation) considère le gaz piégé comme localement équivalent au gaz homogène avec la densité adaptée. Elle devient exacte lorsque le nombre N de particules dans le piège tend vers l'infini.

Nous avons calculé la densité atomique dans le piège pour des températures supérieures à la température de transition de Kosterlitz-Thouless. Nous avons ainsi eu accès aux profils de densité, puis à la température de transition superfluide en fonction du confinement du gaz atomique selon la direction verticale.

7.1 Les approximations

Le hamiltonien du gaz de Bose en interaction, dans un piège harmonique quasi-bidimensionnel s'écrit : $H = H_0 + V$, où H_0 désigne le hamiltonien du système sans interaction :

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \frac{m}{2}(\omega^2(x_i^2 + y_i^2) + \omega_z z_i^2) \right).$$

m est la masse, $\omega = \omega_x = \omega_y$ sont les pulsations de confinement dans le plan $x - y$ et ω_z la plusation de confinement vertical. Le terme d'interaction V s'écrit :

$$V = \sum_{i<j=1}^{N} v(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \tag{7.1}$$

où v est le potentiel d'interaction tridimensionnel.

7.1.1 Hamiltonien de champ moyen

L'approximation de champ moyen consiste à remplacer le terme d'interaction Eq. (7.1) par un potentiel effectif local. C'est-à-dire que chaque boson évolue dans le potentiel créé par l'ensemble des autres bosons. Le hamiltonien devient :

$$H_{cm} = H_0 + V_{cm} \quad \text{avec} \quad V_{cm} = \sum_{i=1}^{N} 2g^{3d} n_{3d}(\vec{r}_i) - g^{3d} \int d\vec{r} [n_{3d}(\vec{r})]^2. \tag{7.2}$$

Le deuxième terme du Hamiltonien d'interaction de champ moyen est une constante, dont le rôle n'est pas déterminant, qu'on négligera par la suite.

Le coefficient g^{3d} donne l'amplitude des interactions. Les collisions atomiques sont tridimensionnelles, et elles sont décrites par la longueur de diffusion en onde s a_0 :

$$g^{3d} = \frac{4\pi\hbar^2 a_0}{m}.$$

Dans les cas étudiés expérimentalement, la portée a_0 du potentiel de diffusion est négligeable devant l'extension verticale typique $l_z = (m\omega_z/\hbar)^{-1/2}$ du nuage atomique. L'amplitude effective bidimensionnelle de l'interaction est $\tilde{g}$ [47] :

$$\tilde{g} = \frac{m g^{3d}}{\hbar^2} \int dz [\psi_0(z)]^4 = \frac{g^{3d}}{l_z} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \sqrt{8\pi} \frac{a_0}{l_z}.$$

Le problème associé au Hamiltonien Eq. (7.2) est résolu numériquement par Holzmann et Krauth [44], avec une méthode de Monte Carlo, en fonction du nombre N de bosons dans le piège.

À l'aide de l'approximation de la densité locale, le problème Eq. (7.2) peut être simplifié à la limite thermodynamique, et résolu de manière semi-analytique. La suite présente plusieurs méthodes qui s'appuient sur ces approximations [42], [43] et [40], et qui permettent de calculer numériquement la température de transition superfluide et le profil de densité du gaz.

7.1.2 Approximation de la densité locale

Dans le cadre de l'approximation de champ moyen, les atomes évoluent dans un potentiel qui capture l'effet des interactions, et qui dépend de la densité moyenne des particules. Ainsi, la connaissance des fonctions d'onde à une particule permet de décrire le gaz. Ces fonctions d'onde sont obtenues par la résolution de l'équation de Schrödinger. En exprimant le hamiltonien de champ moyen à l'aide des variables réduites, l'équation de Schrödinger dans l'ensemble grand canonique est :

$$\left[-\left(\frac{T_{BEC}^{2d}}{\hbar\omega} \right)^{-2} \frac{\Delta_{\tilde{r}}}{2t} - \frac{\tilde{\omega}_z}{2} \frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + \frac{\tilde{\omega}_z \tilde{z}^2}{2} + \frac{2\tilde{g} t \tilde{n}_{3d}(\tilde{r}, \tilde{z})}{\sqrt{2\pi}} + \frac{t\tilde{r}^2}{2} - \tilde{E}_\nu \right] \tilde{\Psi}_\nu(\tilde{r}, \tilde{z}) = 0, \tag{7.3}$$

avec $\tilde{n}_{3d}(\tilde{r}, \tilde{z}) = n_{3d} \lambda^2 l_z$, où n_{3d} est la densité atomique volumique. Voici la signification physique de chacun des termes du Hamiltonien :

– L'énergie cinétique résultant du mouvement dans le plan horizontal correspond au terme $-(T_{BEC}^{2d}/(\hbar\omega))^{-2}\Delta_{\tilde{r}}/2t$.
– $\tilde{\omega}_z d^2/(2d\tilde{z}^2)$ correspond à l'énergie cinétique dans la direction z
– $\tilde{\omega}_z\tilde{z}^2/2$ et $t\tilde{r}^2/2$ sont les énergies potentielles harmoniques respectivement selon z et $x-y$
– Enfin, $2\tilde{g}t\tilde{n}_{3d}(\tilde{r},\tilde{z})/\sqrt{2\pi}$ est l'énergie potentielle d'interaction de champ moyen.

$\tilde{E}_\nu$ est l'énergie propre associée à la fonction d'onde $\tilde{\Psi}_\nu(\tilde{r},\tilde{z})$. Les fonctions d'onde sont normalisées : $\int d\tilde{z}\int d^2\tilde{r}|\tilde{\Psi}_\nu(\tilde{r},\tilde{z})|^2 = 1$.

Les énergies propres et les fonctions propres sont inconnues, ainsi que la densité atomique volumique n_{3d}. La densité réduite $\tilde{n}_{3d}$ s'exprime en fonction des fonctions propres et des énergies propres, à l'aide du facteur d'occupation bosonique :

$$\tilde{n}_{3d}(\tilde{r},\tilde{z}) = \sum_\nu \frac{|\tilde{\Psi}_\nu(\tilde{r},\tilde{z})|^2}{e^{\tilde{E}_\nu/t-\tilde{\mu}}-1}.$$

Dans le Hamiltonien Eq. (7.3), le premier terme, qui correspond à l'énergie cinétique dans le plan $x-y$, contient le facteur $(T_{BEC}^{2d}/(\hbar\omega))^{-2} = (k_B\pi/\sqrt{6N})^2 \propto 1/N$. Pour un grand nombre d'atomes dans le piège, ce terme est négligeable. L'équation de Schrödinger n'a donc plus de terme dépendant de la dérivée spatiale dans le plan $x-y$: la fonction d'onde se factorise alors en un terme décrivant le mouvement dans le plan $x-y$, et un terme décrivant le mouvement selon la direction confinée verticale : $\tilde{\Psi}_\nu(\tilde{r},\tilde{z}) = \tilde{\phi}_\nu(\tilde{z})\tilde{\xi}_\nu(\tilde{r})$. C'est ce qu'on appelle l'approximation de la densité locale. Dans le cadre de cette approximation le nouvel Hamiltonien effectif du problème devient :

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\tilde{z}^2}+\frac{1}{2}\tilde{z}^2+\frac{2\tilde{g}t}{\sqrt{2\pi}\tilde{\omega}_z}\tilde{n}_{3d}(\tilde{r},\tilde{z})\right]\tilde{\phi}_\nu(\tilde{z}) = \frac{\tilde{\epsilon}_\nu}{\tilde{\omega}_z}\tilde{\phi}_\nu(\tilde{z}). \tag{7.4}$$

avec $\tilde{\epsilon}_\nu = \tilde{E}_\nu - t\tilde{r}^2$. La densité atomique réduite s'écrit alors :

$$\tilde{n}_{3d}(\tilde{r},\tilde{z}) = \sum_\nu \frac{|\tilde{\xi}_\nu(\tilde{r})|^2|\tilde{\phi}_\nu(\tilde{z})|^2}{e^{\tilde{\epsilon}_\nu/t-\tilde{\mu}(\tilde{r})}-1}, \quad \text{avec} \quad \tilde{\mu}(\tilde{r}) = \tilde{\mu}-\frac{\tilde{r}^2}{2}. \tag{7.5}$$

À la limite thermodynamique, l'espacement entre les niveaux d'énergie selon x et y est très petit : $\hbar\omega\beta \sim \pi/(\sqrt{6N}t) \to 0$, alors que $\hbar\omega_z$ reste une fraction finie de T_{BEC}^{2d}, c'est-à-dire $\hbar\omega_z \to \infty$. Dans ce cas, les variables x et y peuvent être traitées de manière semi-classique : la densité surfacique d'atomes dans le νième niveau excité selon z est donnée en intégrant l'équation Eq. (6.12). En repassant aux variables réduites :

$$\tilde{n}_{3d}(\tilde{r},\tilde{z}) = \sum_\nu |\tilde{\phi}_\nu(\tilde{z})|^2\tilde{n}_\nu(\tilde{r}) \quad \text{avec} \quad \tilde{n}_\nu(\tilde{r}) = -\ln[1-\exp(\tilde{\mu}(\tilde{r})-\tilde{\epsilon}_\nu/t)]. \tag{7.6}$$

$\tilde{n}_\nu(\tilde{r})$ désigne la densité surfacique réduite d'atomes dans le νième niveau d'énergie selon z. Voici trois méthodes de calcul du profil de densité basées sur cette approche semi-classique, qui font divers degrés d'approximation.

7.2 Calcul du profil de densité

La densité atomique $\tilde{n}_{3d}$ est déterminée de manière à ce que la densité calculée en résolvant l'équation de Schrödinger avec le Hamiltonien H_{cm} (Eq. (7.2)) coïncide avec la densité utilisée dans ce Hamiltonien. La solution est calculée numériquement et donne accès au profil de densité $\tilde{n}(\tilde{r})$, qui est l'intégrale de la densité atomique sur la variable réduite $\tilde{z}$:

$$\int d\tilde{z} \quad \tilde{n}_{3d}(\tilde{r},\tilde{z}) = \tilde{n}(\tilde{r}). \tag{7.7}$$

Les trois méthodes présentées dans la suite correspondent à des approximations légèrement différentes, mais donnent des résultats très proches.

7.2.1 Résolution numérique auto-consistante des équations Eq. (7.5) et Eq. (7.6)

Les équations Eq. (7.5) et Eq. (7.6) sont résolues numériquement, sans faire d'hypothèse supplémentaire au sujet des fonction d'onde $\tilde{\phi}_\nu$.

À partir d'un profil de densité initial d'essai $\tilde{n}^0_{3d}(\tilde{r},\tilde{z})$, on résout numériquement l'équation Eq. (7.5). Les fonctions propres $\tilde{\phi}_\nu$ et les énergies propres $\tilde{\epsilon}_\nu$ ainsi obtenues donnent la nouvelle densité réduite $\tilde{n}^1_{3d}$ à l'aide de l'Eq. (7.6). On résoud à nouveau l'équation de Schrödinger Eq. (7.5) en utilisant cette nouvelle densité, pour calculer $\tilde{n}^2_{3d}$. Le procédé est réitéré jusqu'à atteindre un point fixe, c'est-à-dire jusqu'à ce que la densité réduite de sortie $\tilde{n}^{n+1}_{3d}$ soit égale à la densité d'entrée $\tilde{n}^n_{3d}$ (à une erreur près). La densité $\tilde{n}^{n+1}_{3d}$ ainsi obtenue est la solution du problème.

La résolution numérique de ce problème auto-consistant passe par la discrétisation de l'espace selon z. Cette méthode a été utilisée dans [42] pour calculer les profils de densité.

7.2.2 Développement sur la base propre de l'oscillateur harmonique

Pour un gaz idéal, $\tilde{g} = 0$ et les fonctions d'onde réduites $\tilde{\phi}_\nu(\tilde{z})$ sont exactement les fonctions d'onde réduites $\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z})$, de l'oscillateur harmonique unidimensionnel de pulsation ω_z. Elles vérifient l'équation différentielle :

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + \tilde{z}^2\right)\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z}) = (\nu + \frac{1}{2})\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z}). \tag{7.8}$$

Elles s'écrivent :

$$\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z}) = c_n e^{-\tilde{z}^2/2} H_n(\tilde{z}) \quad \text{avec} \quad c_n = (\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2},$$

où H_n est le polynôme de Hermite défini par

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2}).$$

Pour un gaz en interaction, les fonctions d'onde $\tilde{\phi}_\nu$ sont développées sur la base propre de l'oscillateur harmonique $(\tilde{\psi}_0, \tilde{\psi}_1, ..., \tilde{\psi}_n, ...)$:

$$\tilde{\phi}_\nu(\tilde{z}) = \sum_\mu a_{\mu\nu}\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z}).$$

On peut tronquer cette somme à partir des niveaux d'énergie beaucoup plus grands que l'énergie du système, ce qui revient à discrétiser le problème.

L'équation Eq. (7.5) se traduit sous forme matricielle :

$$\left(\mathbf{A} - \frac{\tilde{\epsilon}_\nu}{\tilde{\omega}_z}\right)\mathbf{a}_\nu = 0.$$

Il s'agit de déterminer les vecteurs propres $\mathbf{a}_\nu = (a_{0\nu}, ..., a_{n\nu}, ...)$ de la matrice carrée de taille $n+1$:

$$A_{\mu\nu} = \left(\tilde{\mu}(\tilde{r}) + \frac{1}{2}\right)\delta_{\mu\nu} + \frac{2\tilde{g}t}{\sqrt{2\pi}\tilde{\omega}_z}\int d\tilde{z}\tilde{\psi}_\mu(\tilde{z})\tilde{n}_{3d}(\tilde{r},\tilde{z})\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z}) \quad \text{avec} \quad 0 \leq \mu, \nu \leq n,$$

et $\tilde{n}_{3d}(\tilde{r},\tilde{z})$ est défini par Eq. (7.6).

Cette méthode est utilisée dans [44], et fait appel à un programme standard de diagonalisation des matrices de taille 10. Si on tient compte des 10 premiers niveaux excités selon z, cette méthode est pratiquement exacte.

7.2.3 Première hypothèse simplificatrice

Si l'interaction est faible, on peut négliger les coefficients non diagonaux de la matrice $\mathbf{A}$: $A_{\mu\nu} = 0$ si $\mu \neq \nu$. Alors, les fonctions propres sont celles de l'oscillateur harmonique. Dans le cadre de cette approximation, l'équation Eq. (7.5) se simplifie à l'aide de Eq. (7.8) :

$$(\nu + \frac{1}{2})\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z}) + \frac{2\tilde{g}t}{\sqrt{2\pi}\tilde{\omega}_z}\sum_{\nu'}\tilde{n}_{\nu'}(\tilde{r})|\tilde{\psi}_{\nu'}(\tilde{z})|^2\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z}) = \frac{\tilde{\epsilon}_\nu}{\tilde{\omega}_z}\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z}).$$

En multipliant cette égalité par $\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z})$, puis en intègrant sur la variable réduite $\tilde{z}$ on obtient l'énergie réduite au premier ordre en $\tilde{g}$:

$$\frac{\tilde{\epsilon}_\nu}{\tilde{\omega}_z} = (\nu + \frac{1}{2}) + \frac{2\tilde{g}t}{\sqrt{2\pi}\tilde{\omega}_z}\sum_{\nu'}\tilde{n}_{\nu'}(\tilde{r})\int d\tilde{z}|\tilde{\psi}_{\nu'}(\tilde{z})|^2|\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z})|^2. \tag{7.9}$$

La matrice des coefficients d'intéraction $g_{\nu,\nu'}$ est définie comme :

$$g_{\nu\nu'} = \frac{4\pi a\hbar^2}{m}\int \psi_\nu(z)^2\psi_{\nu'}(z)^2dz = \frac{g}{l_z}\int d\tilde{z}|\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z})|^2|\tilde{\psi}_{\nu'}(\tilde{z})|^2. \tag{7.10}$$

Ces coefficients sont obtenus numériquement à l'aide d'un programme Fortran.

Le profil de densité en fonction des variables réduites Eq. (7.7) est calculé numériquement de manière auto-consistante, en résolvant le système suivant :

$$\begin{aligned}\tilde{n}(\tilde{r}) &= -\sum_\nu \ln(1 - e^{\beta(\tilde{\mu}(\tilde{r}) - \tilde{\epsilon}_\nu/t}) \\ \frac{\tilde{\epsilon}_\nu}{\tilde{\omega}_z} &= (\nu + \frac{1}{2}) + \frac{2t}{\sqrt{2\pi}\tilde{\omega}_z}(\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}l_z}\sum_{\nu'} g_{\nu\nu'}\tilde{n}_{\nu'}(\tilde{r}),\end{aligned} \tag{7.11}$$

auquel il faut ajouter la condition de normalisation

$$\int_0^\infty d\tilde{r} \quad \tilde{r}\tilde{n}(\tilde{r}) = \frac{\pi^2}{6t^2}. \tag{7.12}$$

Pour la résolution numérique de ce système, nous n'avons considéré que les modes pour ν variant de 0 à 20, ce qui donne une précision tout à fait suffisante, et retrouve les résultats de [43]. La condition Eq. (7.12) permet de déterminer numériquement la valeur du potentiel chimique : il doit être choisi de manière à ce que le nombre de bosons dans le piège vaille N.

$$N = 2\pi \int dr \quad rn(r) \quad \text{i.e.} \quad \int_0^\infty d\tilde{r} \quad \tilde{r}\lambda^2 n(\tilde{r}) = \frac{\pi^2}{6t^2}\frac{1}{m\omega^2}.$$

Il s'agit de déterminer le potentiel chimique réduit au centre du piège : $\tilde{\mu}(0)$. Ce problème est résolu par un algorithme de bisection.

Nous avons résolu ces équations numériquement, et retrouvé les résultats annoncés dans [43] (Fig. 7.1). Dans la suite je fais référence à cette méthode comme "méthode BBB", du nom de Bisset, Baillie et Blakie.

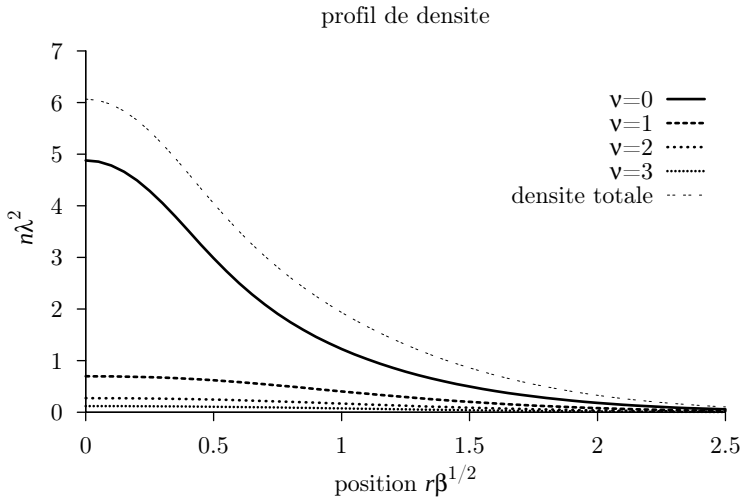


FIG. 7.1 – Profils de densité pour $t = 0.71$ et $\tilde{g} = 0.13$, obtenus par résolution numérique du système d'équations Eq. (7.11). La densité de bosons dans le mode axial $\nu = 0$ représente environ 80 pourcent de la densité totale.

Cependant, la méthode que nous avions initialement proposée [40] s'appuie sur des hypothèses empiriques, qui facilitent les calculs et rendent bien compte de la physique.

7.2.4 Hypothèse empirique

Nous présentons dans [40] une méthode pour calculer le profil de densité du gaz piégé quasi-bidimensionnel en champ moyen. Cette méthode s'appuie sur une hypothèse

empirique concernant l'expression de la densité de bosons dans le piège. Nous supposons :

$$n_{3d}(\vec{r}) = n(\mathbf{r})\rho^{ho}(z,z), \tag{7.13}$$

où $\rho^{ho}(z,z)$ désigne la matrice densité pour une particule dans le piège harmonique de fréquence ω_z. En fonction des variables réduites le potentiel d'interaction de champ moyen vaut $2g^{(3d)}\tilde{n}(\tilde{r})\tilde{\rho}^{ho}(\tilde{z},\tilde{z})$, avec

$$\tilde{\rho}^{ho}(\tilde{z},\tilde{z}) = l_z\rho^{ho}(z,z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{1-e^{-2\tilde{\omega}_z/t}}\exp(-\tilde{z}^2\tanh(\tilde{\omega}_z/(2t))).$$

Il se factorise en deux termes : l'un ne dépend que de la position dans le plan (x,y), l'autre ne dépend que de la position verticale. Cette hypothèse a l'avantage de donner lieu à une solution presque analytique, et de bien rendre compte des résultats expérimentaux et des simulations Monte Carlo.

Sous cette hypothèse (Eq. (7.13)), l'énergie réduite du νième mode axial au point (x,y) du plan est, d'après Eq. (7.9) :

$$\frac{\tilde{\epsilon}_\nu}{\tilde{\omega}_z} = (\nu+\frac{1}{2}) + \frac{2\tilde{g}t}{\sqrt{2\pi}\tilde{\omega}_z}\tilde{n}(\tilde{r})\int d\tilde{z}|\tilde{\psi}_\nu(\tilde{z})|^2\tilde{\rho}(\tilde{z},\tilde{z}).$$

Notre deuxième hypothèse consiste à remplacer

$$\int dz\rho^{ho}(z,z)|\phi_\nu(z)|^2 \quad \text{par} \quad \sum_{\nu'}e^{-\beta\epsilon_{\nu'}}\int dz\rho^{ho}(z,z)|\phi_\nu(z)|^2 = \int dz[\rho^{ho}(z,z)]^2.$$

Ainsi, l'énergie du νième mode est :

$$\frac{\tilde{\epsilon}_\nu}{\tilde{\omega}_z} = (\nu+\frac{1}{2}) + \frac{2gt}{\sqrt{2\pi}\tilde{\omega}_z}\tilde{n}(\tilde{r}),$$

avec

$$g = g^{3d}\int dz[\rho^{ho}(z,z)]^2 = \frac{g^{3d}}{l_z}\int d\tilde{z}(\tilde{\rho}(\tilde{z},\tilde{z}))^2 = \tilde{g}\sqrt{\tanh(\tilde{\omega}_z/(2t))}. \tag{7.14}$$

Le coefficient d'interaction g dépend de la température du système, car la matrice densité ρ^{ho} en dépend. Cette dépendance par rapport à la température est obtenue de façon empirique, mais elle correspond bien à la réalité physique.

Enfin, l'intégration de l'équation Eq. (7.6) selon z donne le profil de densité :

$$\tilde{n}(\tilde{r}) = -\sum_\nu \ln\left(1-e^{\tilde{\mu}-\tilde{\epsilon}_\nu^{\mathrm{HCK}}/t)}\right).$$

Ces approximations déterminent la méthode que je nomme dans la suite 'HCK', d'après [40]. Pour une température donnée t, nous résolvons numériquement le système suivant, afin de connaître le potentiel chimique $\tilde{\mu}$ et la densité au centre. Les équations sont désormais écrites en fonction des variables réduites :

$$t = \left(\frac{6}{\pi^2}\left[\sum_{\nu=0}^{\infty}F(-\tilde{\mu}+\nu\frac{\tilde{\omega}_z}{t}) + \frac{mg}{2\pi\hbar^2}[\tilde{n}(0)]^2\right]\right)^{-1/2} \tag{7.15}$$

$$\tilde{n}(0) = -\sum_{\nu=0}^{\infty}\ln\left(1-\exp\left(\tilde{\mu}-\nu\tilde{\omega}_z/t\right)\right).$$

Le potentiel chimique étant déterminé, le profil de densité est donné en fonction de $\tilde{\mu}$ par :

$$\tilde{n}(\tilde{v}) = -\sum_{\nu=0}^{\infty} \ln\left(1 - \exp\left(\tilde{\mu} - \tilde{v} - \nu\tilde{\omega}_z/t\right)\right).$$

Pour connaître la densité en fonction de la position $\tilde{r}$, il ne reste plus qu'à utiliser l'équation suivante :

$$r(n\lambda^2, \tilde{v}) = \sqrt{\frac{2T}{m\omega^2}\left(\tilde{v} - \frac{mgn\lambda^2}{\pi\hbar^2}\right)}, \quad \text{c'est-à-dire} \quad \tilde{r} = \sqrt{\tilde{v} - \frac{mg\tilde{n}}{\pi\hbar^2}}.$$

7.2.5 Comparaison des résultats

Les profils de densité obtenus par la méthode BBB (Section 7.2.3) sont quasiment identiques à ceux obtenus à l'aide de l'approximation de la densité locale (ADL), en résolvant numériquement les équations Eq. (7.5) et Eq. (7.6). Ces résultats sont très proches de ceux qu'on obtient avec la méthode HCK, en utilisant $\tilde{g}$ au lieu du coefficient d'interaction empirique g de l'Eq. (7.14). En fait, pour le calcul des profils de densité au-dessus de la transition superfluide, les méthodes de champ moyen décrites ci-dessus (Section 7.2.1, Section 7.2.2, Section 7.2.3 et Section 7.2.4 en utilisant le coefficient $\tilde{g}$ au lieu de g) sont équivalentes pour le niveau de précision qui nous intéresse.

Les figures Fig. 7.2 et Fig. 7.3 montrent que la différence entre les profils de densité obtenus par la méthode strictement champ moyen, et la méthode de champ moyen avec le coefficient d'interaction empirique augmente lorsque la température diminue, et que le gaz est plus fortement dégénéré.

Ceci s'explique par le fait que les méthodes strictement champ moyen ne tiennent pas compte des effets des corrélations entre particules, alors que la méthode HCK avec le coefficient d'interaction empirique g, tient compte de la réduction de l'interaction dû aux effets des corrélations entre particules. C'est pourquoi les profils de densité obtenus en utilisant le coefficient d'interaction empirique correspondent mieux aux résultats des simulations Monte Carlo.

Les profils de densité sont très sensibles à la valeur du coefficient d'interaction effectif bidimensionnel g.

Dans la méthode Section 7.2.3, le mode axial $\nu = 0$ détermine l'allure générale du profil de densité (Fig. 7.1). Pour calculer la densité de bosons dans le fondamental selon z, le coefficient d'interaction effectif est $g_{00} = \tilde{g} = 0.13$ (Eq. (7.10)). Il ne dépend pas de la température. A $t = 0.71$, le coefficient effectif de la méthode HCK vaut $g = \tilde{g}\sqrt{\tanh(\tilde{\omega}_z/(2t))} = \tilde{g}\sqrt{\tanh(0.387)} \sim \tilde{g}/2$. Le coefficient effectif empirique g donne une interaction plus faible que dans la méthode BBB, c'est pourquoi la densité au centre est plus élevée avec la méthode HCK qu'avec la méthode BBB.

L'importance de l'influence du coefficient effectif d'interaction sur le profil de densité explique les différences observées sur les profils, suivant la méthode utilisée. En effet, l'utilisation de la méthode BBB en divisant par deux les coefficients d'interaction $g_{\nu,\nu'}$ donne presque les mêmes profils que la méthode HCK (Fig. 7.4).

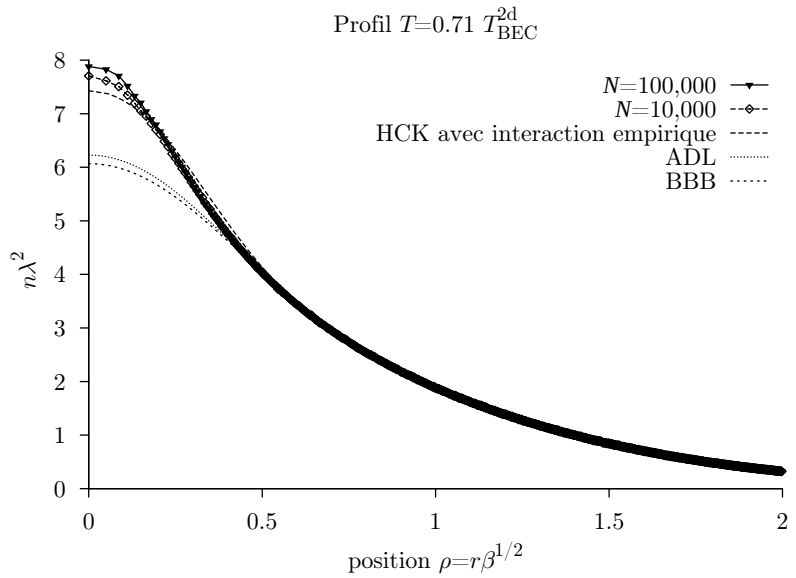


FIG. 7.2 – Pour $t = 0.71$ et $\tilde{g} = 0.13$, profils de densité obtenus par la méthode BBB (Section 7.2.3), par la méthode HCK (Section 7.2.4), et par l'approximation de la densité locale ADL (Section 7.2.1), comparés avec les résultats des simulations Monte Carlo. Alors que BBB et ADL donnent des profils presque identiques, la méthode de champ moyen HCK, avec son coefficient d'interaction empirique dépendant de la température, prévoit une densité au centre plus élevée. Cette prédiction est plus proche des résultats des simulations Monte Carlo que les méthodes strictement de champ moyen.

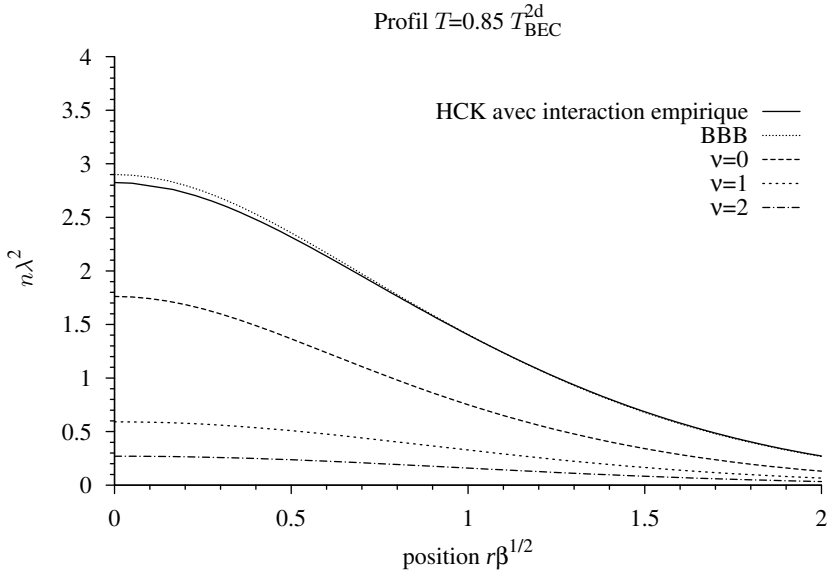


FIG. 7.3 – $t = 0.85$, profils de densité obtenus par les méthodes Section 7.2.3 (courbe BBB) et Section 7.2.4 (courbe HCK). Le gaz est moins dégénéré qu'à $t = 0.71$, et les courbes données par les deux méthodes sont plus proches qu'à $t = 0.71$.

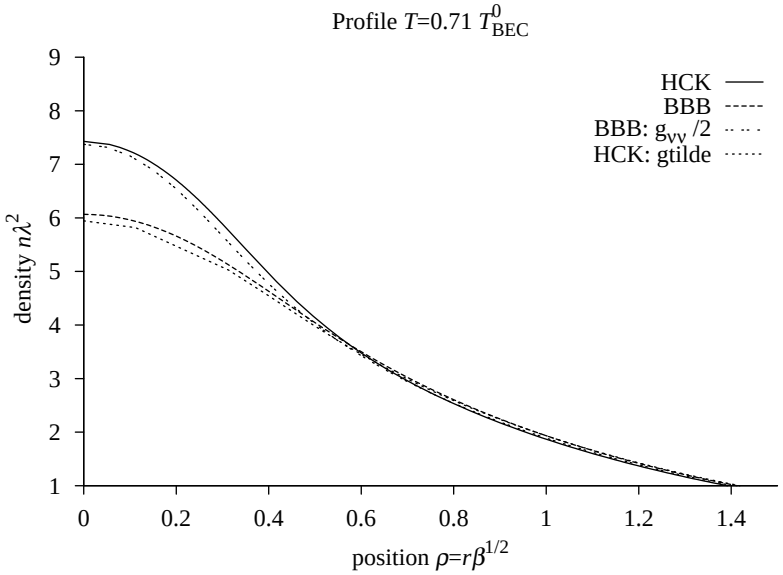


FIG. 7.4 – Profils de densité obtenus avec les méthodes de [43] et de [40], pour $t = 0.71$. J'ai ajouté artificiellement des courbes obtenues par la méthode [43], en divisant le coefficient d'intéraction par 2. On retombe alors exactement sur la courbe de [40]. Ceci montre que pour une valeur du coefficient g du même ordre que le coefficient g_{00}, les deux méthodes donnent les mêmes résultats. En effet, dans la méthode [43], c'est le niveau axial fondamental $\nu = 0$ qui détermine principalement l'allure de la courbe Fig. 7.1, donc la valeur de g_{00} est déterminante.

Les méthodes de champ moyen présentées ici ne permettent pas d'évaluer directement la température de transition de Kosterlitz-Thouless. En revanche, à la limite thermodynamique l'approximation de la densité locale devient exacte, et ces méthodes de champ moyen permettent de conclure qu'il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein dans le gaz piégé quasi-bidimensionnel avec des interactions répulsives.

7.3 Absence de condensation de Bose–Einstein

L'équation d'état

$$N = \frac{T^2}{\hbar^2\omega^2}\left(\sum_{\nu=0}^{\infty} F_2(-\tilde{\mu} + \nu\beta\hbar\omega_z) + \frac{mg}{2\pi\hbar^2}(n(0)\lambda^2)^2\right)$$

donne le nombre de bosons en fonction du potentiel chimique réduit $\tilde{\mu}$. Il y a condensat de Bose-Einstein si le nombre de bosons tend vers une valeur finie N_{sat} lorsque le potentiel chimique tend vers zéro. Ici, d'après l'équation

$$\lambda^2 n(0) = -\sum_{\nu=0}^{\infty} \ln(1 - e^{\tilde{\mu} - \nu\tilde{\omega}_z/t}),$$

la densité au centre diverge logarithmiquement lorsque $\tilde{\mu}$ tend vers zéro. Le nombre de saturation est donc infini, et la condensation de Bose-Einstein est impossible à température non nulle pour ce système, à la limite thermodynamique. En revanche des effets des

interactions plus subtils que la théorie de champ moyen présentée ici montrent qu'il existe une transition superfluide à température finie pour le gaz piégé quasi-bidimensionnel en interaction. ([35]).

7.4 Calcul de la température de transition superfluide

Pour un système homogène bidimensionnel avec des interactions faibles entre les atomes, la transition de Kosterlitz-Thouless a lieu lorsque la densité d'atomes atteint la valeur critique n_c déterminée par [45] :

$$n_c\lambda^2 = \ln \frac{\xi}{mU}, \tag{7.16}$$

où U désigne le coefficient d'interaction effectif bidimensionnel.

Cette condition concerne la densité totale, que nous savons calculer à l'aide de la théorie de champ moyen présentée précédemment. La densité critique dépend du système considéré, car elle dépend de $\tilde{g}$. Ce n'est pas une quantité universelle.

Prokof'ev *et al.* [46] ont calculé numériquement la valeur de la constante $\xi = 380 \pm 3$, grâce à des simulations numériques du modèle bidimensionnel $|\psi|^4$ sur un réseau. À l'aide de leur résultat, il est possible de calculer explicitement la densité critique pour les systèmes qui nous intéressent.

Dans notre étude, nous avons calculé la température de transition BKT en utilisant $U = g$ dans l'équation Eq. (7.16), où g est le coefficient d'interaction effectif défini en Eq. (7.14).

Comme dans [8], nous considérons que le point critique de la transition de Kosterlitz Thouless est atteint lorsque la densité au centre du piège atteint la densité critique n_c calculée par Prokof'ev *et al.*. Bien que leur calcul s'applique au gaz homogène, nous considérons que le gaz piégé se comporte localement comme le gaz homogène. Comme la densité de bosons dans le piège n'est pas homogène, mais qu'elle est plus forte au centre qu'en périphérie, la transition de Kosterlitz Thouless n'a pas lieu de manière uniforme dans le système. Les particules du centre, où la densité est forte connaissent d'abord la transition superfluide, puis si on descend la température la phase superfluide s'étend spatialement vers la périphérie du piège. Ceci s'explique par la dépendance du potentiel chimique réduit en fonction de la distance au centre du piège Eq. (7.5).

Nous avons défini la température de transition de Kosterlitz Thouless comme la solution t de l'équation :

$$n(0)\lambda^2 = n_c\lambda^2 \quad \text{avec} \quad n_c\lambda^2 = \log(\frac{380\hbar^2}{mg}) \quad \text{et} \quad g = \tilde{g}\sqrt{\tanh(\tilde{\omega}_z/(2t))}. \tag{7.17}$$

Nous calculons t_{BKT} en fonction du confinement $\tilde{\omega}_z$, par un algorithme de bisection Fig. 7.5.

Pour les paramètres de l'expérience du LKB, $n(0)\lambda^2 \sim 8$ et $t_{\mathrm{BKT}} = 0.69$, alors que pour l'expérience du NIST, $n(0)\lambda^2 \sim 10$ et $t_{\mathrm{BKT}} = 0.74$.

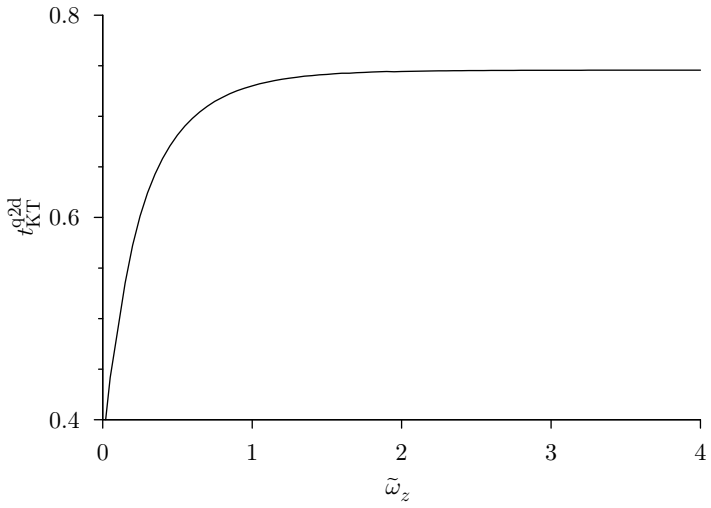


FIG. 7.5 – Température de transition superfluide, pour le gaz quasi-bidimensionnel piégé, en interaction répulsive d'intensité $\tilde{g}$, en fonction du confinement vertical du piège. La température réduite $t = T/T_{\rm BEC}^{2d}$ est donnée en fonction de la pulsation réduite : $\tilde{\omega}_z = \hbar\omega_z/(k_B T_{\rm BEC}^{2d})$ (selon [40]).

7.5 Conclusion

Nous nous sommes intéressés au gaz quasi-bidimensionnel piégé à des températures supérieures à la température de transition superfluide, mais pour lesquelles le gaz est déjà dégénéré. Les méthodes de champ moyen sont valables tant que le gaz est peu dégénéré. Cependant, elle sont inadéquates pour une température inférieure à la température de transition, et deviennent déjà douteuses au voisinage de la transition superfluide. En effet, avant la transition superfluide, le gaz passe par une phase normale mais fortement corrélée, dans laquelle les corrélations diminuent le coefficient d'interaction effectif. Dans cette phase normale très corrélée, le gaz est déjà dégénéré et les fluctuations de densité sont réduites. Alors, le coefficient 2 devant le paramètre d'interaction dans Eq. (7.2) devient en fait un coefficient inférieur à 2. C'est pourquoi les méthodes strictement de champ moyen donnent des profils de densité de plus en plus différents des résultats des simulations Monte Carlo, plus on s'approche de la transition superfluide.

À partir de la température de dégénérescence, la distance entre atomes est de l'ordre de la longueur de de Broglie et les atomes deviennent indiscernables. Alors, les corrélations de paires sont modifiées. L'effet des corrélations sur le coefficient d'interaction effectif est expliqué dans [44].

Conclusion générale

La première partie de ce manuscrit explicite la relation entre la condensation de Bose-Einstein et la statistique des longueurs de cycles dans les permutations. Le résultat principal est l'équivalence entre le paramètre d'ordre de Penrose et Onsager (existence d'une valeur propre macroscopique de la matrice densité réduite à une particule), et celui de Feynman (existence de cycles de longueur infinie dans les permutations) pour la condensation de Bose-Einstein, dans des systèmes sans interaction. Ce résultat se généralise probablement aux gaz en interaction, pour lesquels nous avons présenté des arguments en faveur de l'équivalence entre la condensation de Bose-Einstein et l'apparition de cycles de longueur infinie.

La formulation en intégrale de chemin du gaz de Bose permet d'étudier aussi bien la condensation de Bose-Einstein que la superfluidité. L'interprétation de ces deux phénomènes en terme de longueur de cycle pourrait permettre de distinguer mathématiquement la condensation de Bose-Einstein de la superfluidité. L'étude du gaz homogène bidimensionnel en interaction, qui admet une transition superfluide mais pas de transition de Bose-Einstein, est cruciale pour comprendre l'influence des interactions sur la distribution des longueurs de cycles. Des simulations Monte Carlo pour le gaz homogène bidimensionnel seraient nécessaires pour comprendre comment la réduction de la dimension du système affecte l'allure des chemins imaginaires, en présence d'interactions.

Nous avons utilisé l'approche du gaz de Bose en terme de longueur des cycles pour l'étude des gaz atomiques piégés quasi-bidimensionnels. La prise en compte de l'excitation thermique résiduelle du mouvement vertical dans les pièges a permis d'expliquer l'allure des profils de densité observés expérimentalement, et dans les simulations numériques. Une théorie de champ moyen adaptée à la géométrie des expériences rend bien compte des profils de densité observés, au-dessus de la température de transition superfluide. Les trois approches de champ moyen décrites dans ce manuscrit donnent essentiellement les mêmes résultats pour des températures supérieures à la température de transition superfluide, et sont suffisantes pour les besoins des expériences. Cependant, dans une grande gamme de températures, le gaz est dégénéré, sans que la transition superfluide soit atteinte. Alors, la théorie de champ moyen devient inadéquate. Il convient d'aller au-delà du champ moyen et de tenir compte des effets des corrélations de paires.

8

Annexes

8.1 Démonstration du lemme Eq. (3.29)

Pour le gaz idéal tridimensionnel avec conditions aux limites périodiques, en présence de condensat (c'est-à-dire $T < T_{\mathrm{BEC}}^{\mathrm{hom}}$), le lemme suivant est vérifié :

$$\text{Lemme :} \quad \lim_{N\to\infty} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} = \mathbf{1}_{k\leq N_0} \tag{8.1}$$

où $\mathbf{1}_{k\leq N_0}$ désigne la fonction caratéristique qui vaut 1 sur l'intervalle $[0, N_0[$ et 0 sur $[N_0, 1]$, et N_0 désigne le nombre de bosons dans le condensat.

Pour un gaz de Bose idéal à N particules, la probabilité d'avoir exactement k bosons dans les niveaux excités s'écrit $P_N(N_{\mathrm{exc}} = k) = (Z_k - Z_{k-1})/Z_N$ (voir Section 2.2). Reformulons ce résultat à l'aide des propriétés des séries téléscopiques, afin d'exprimer le rapport Z_{N-k}/Z_N en fonction de la distribution du nombre de particules hors du condensat :

$$\frac{Z_k}{Z_N} = 1 - \sum_{l=k+1}^{N} P_N(N_{\mathrm{exc}} = l) \quad \text{donc} \quad \frac{Z_{N-k}}{Z_N} = 1 - \sum_{l=N-k+1}^{N} P_N(N_{exc} = l)$$

Le théorème suivant est utile à la démonstration du lemme Eq. (8.1) :

Soit X une variable aléatoire d'espérance μ et de variance finie σ^2 (l'hypothèse de variance finie garantit l'existence de l'espérance). L'inégalité de Bienaymé-Tchebychev s'énonce de la façon suivante :

$$\text{Théorème : pour tout réel strictement positif } \alpha, \quad P\left(|X-\mu| \geq \alpha\sigma\right) \leq \frac{1}{\alpha^2}. \tag{8.2}$$

Appliquons le théorème Eq. (8.2) à la variable aléatoire N_{exc}. Son espérance est $\langle N_{\mathrm{exc}}\rangle = N - N_0$. La suite (Section 8.2) montre qu'à la limite thermodynamique sa variance est $\sigma \sim L^2/(2\pi\beta)^{3/2}$, en présence de condensat.

Calculons $Z_{N-[xN]}/Z_N$, pour $0 \leq x \leq 1$, à la limite $N \to \infty$, où $[x]$ désigne la partie entière de x.

$$\frac{Z_{N-[xN]}}{Z_N} = 1 - \sum_{l=N-[xN]+1}^{N} P_N(N_{hc} = l)$$

Calcul de $Z_{N-[xN]}/Z_N$ pour $x < \eta_0$

Si $x < \eta_0$, alors il existe $\epsilon > 0$ tel que $x = \eta_0 - \epsilon$. D'après la définition de la partie entière $[xN] < \eta_0 N - \epsilon N + 1$, et donc pour tout indice l de la somme on a $l - (N - N_0) > \epsilon N$. Comme les événements $(N_{\text{exc}} = l)$ et $(N_{\text{exc}} = l')$ sont disjoints pour deux valeurs distinctes de l et l', on a

$$|1 - \frac{Z_{N-[xN]}}{Z_N}| = \sum_{l=N-[xN]+1}^{N} P_N(N_{\text{exc}} = l) \leq P_N(N_{\text{exc}} - \langle N_{\text{exc}} \rangle > \epsilon N). \tag{8.3}$$

L'inéquation Eq. (8.1) et l'inégalite de Bienaymé-Tchebychev Eq. (8.2), avec $\alpha = \epsilon L(2\pi\beta)^{3/2}$ permettent de conclure :

$$|1 - \frac{Z_{N-[xN]}}{Z_N}| \leq P_N(N_{\text{exc}} - \langle N_{\text{exc}} \rangle > \alpha) \leq \frac{1}{(\epsilon L(2\pi\beta)^{3/2})^2} \to 0.$$

Donc pour tout $x < \eta_0$, $Z_{N-[xN]}/Z_N \to 1$ si $N \to \infty$.

Calcul de $Z_{N-[xN]}/Z_N$ pour $x > \eta_0$

Un raisonnement similaire s'applique au cas $x > \eta_0$. En utilisant la normalisation à 1 de la somme des probabilités, le rapport à calculer s'écrit :

$$\frac{Z_{N-[xN]}}{Z_N} = \sum_{l=0}^{N-[xN]} P_N(N_{\text{exc}} = l).$$

Si $x > \eta_0$, alors il existe $\epsilon > 0$ tel que $x = \eta_0 + \epsilon$. Alors $N_0 + \epsilon N \leq [xN]$, tout indice l de la somme vérifie donc $l \leq N - N_0 - \epsilon N$, c'est-à-dire $|l - (N - N_0)| > \epsilon N$. Comme les événements $(N_{\text{exc}} = l)$ et $(N_{\text{exc}} = l')$ sont disjoints pour deux valeurs distinctes de l et l', on a

$$\frac{Z_{N-[xN]}}{Z_N} = \sum_{l=0}^{N-[xN]} P_N(N_{\text{exc}} = l) \leq P_N(|N_{\text{exc}} - \langle N_{\text{exc}} \rangle| > \epsilon N).$$

L'inégalité de Bienaymé-Tchebychev Eq. (8.2) avec $\alpha = \epsilon L(2\pi\beta)^{3/2}$ permet de conclure :

$$\frac{Z_{N-[xN]}}{Z_N} \leq P_N(|N_{\text{exc}} - (N - \langle N_0 \rangle)| > \epsilon N) \leq \frac{1}{(\epsilon L(2\pi\beta)^{3/2})^2} \to 0. \tag{8.4}$$

Conclusion

En conclusion, pour tout $x < \eta_0$, $\lim_{N\to\infty} \frac{Z_{N-[xN]}}{Z_N} = 1$, et pour tout $x > \eta_0$, $\lim_{N\to\infty} \frac{Z_{N-[xN]}}{Z_N} = 0$. Ceci démontre le résultat Eq. (8.1).

8.2 Variance de la variable aléatoire $N_{\mathbf{exc}}$ en présence de condensat

Pour un gaz de Bose idéal tridimensionnel, avec conditions aux limites périodiques, la condensation de Bose-Einstein est atteinte lorsque la température T est inférieure à la température de transition $T_{\mathrm{BEC}}^{\mathrm{hom}}$. Un nombre macroscopique de bosons se trouve alors dans l'état fondamental, qui joue le rôle de réservoir pour les particules qui sont dans les états excités. Ainsi, le calcul des fluctuations du nombre de bosons excités est le même que dans l'ensemble grand canonique, avec un potentiel chimique égal à l'énergie du fondamental. L'énergie du fondamental est $\epsilon_0 = 0$. La variance de la variable N_{exc} est :

$$\left\langle N_{\mathrm{exc}}^2 \right\rangle - \langle N_{\mathrm{exc}} \rangle^2 = \sum_{n \in Z^3/(0,0,0)} \frac{1}{\exp(\beta\epsilon_n) - 1} + \frac{1}{(\exp(\beta\epsilon_n) - 1)^2}.$$

Calculons ces fluctuations pour L qui tend vers l'infini. On reconnaît des sommes de Riemann, équivalentes aux intégrales correspondantes. Le premier terme donne le nombre de saturation dans l'ensemble grand canonique. Le deuxième terme nécessite une étude précise.

$$\sum_{n \in Z^3/(0,0,0)} \frac{1}{\exp(\beta\epsilon_n) - 1} \sim_{L\to\infty} \frac{L^3}{(2\pi\beta)^{3/2}} \zeta(3/2) = \langle N_{\mathrm{exc}}^{\mathrm{gc}} \rangle$$

$$\sum_{n \in Z^3/(0,0,0)} \frac{1}{(\exp(\beta\epsilon_n) - 1)^2} \sim_{L\to\infty} \frac{L^3}{\pi^3 (2\beta)^{3/2}} \sum_{\tilde{n} \in (\Delta Z)^3/(0,0,0)} \frac{1}{(1 - \exp(-\tilde{n}^2))^2}$$

avec $\tilde{n} = (\Delta n_x, \Delta n_y, \Delta n_z)$ et $\Delta = \sqrt{2\beta}\pi/L$. Lorsque L tend vers l'infini, cette somme est équivalente à une intégrale. Après passage en coordonnées sphériques on obtient :

$$\sum_{n \in Z^3/(0,0,0)} \frac{1}{(\exp(\beta\epsilon_n) - 1)^2} \sim_{L\to\infty} \frac{L^3}{\pi^3 (2\beta)^{3/2}} \int_\Delta^\infty 4\pi r^2 dr \frac{1}{(1 - \exp(-r^2))^2}.$$

Comme $4\pi r^2 \frac{1}{(1-\exp(-r^2))^2} \sim r^{-2}$ pour r petit, l'intégrale diverge si Δ tend vers 0 (c'est-à-dire si L tend vers l'infini). En revanche, pour tout réel x positif $\int_x^\infty 4\pi r^2 dr \frac{1}{(1-\exp(-r^2))^2}$ a une valeur finie. Donc les fluctuations sont déterminées par la valeur de l'intégrale pour Δ petit.

$$\int_\Delta^{2\Delta} 4\pi r^2 dr \frac{1}{(1 - \exp(-r^2))^2} \sim \int_\Delta^{2\Delta} 4\pi r^{-2} dr \sim \frac{4\pi}{\Delta}$$

Finalement, c'est le deuxième terme qui domine et qui détermine le comportement asymptotique de la variance :

$$\left\langle N_{\mathrm{exc}}^2 \right\rangle - \langle N_{\mathrm{exc}} \rangle^2 \sim \frac{L^3}{\pi^3 (2\beta)^{3/2}} \frac{4\pi}{\sqrt{2\beta}\pi/L} = \frac{L^4}{(2\beta\pi)^3}.$$

La dispersion de la distribution de probabilité des N_{exc} est donc $\frac{L^2}{(2\beta\pi)^{3/2}}$.

8.3 Equivalence entre condensation de Bose-Einstein et existence de cycles infinis, pour le gaz de Bose idéal piégé quasi-bidimensionnel

Dans cette partie, j'adapte le calcul de la Section 3.2 au cas du piège quasi bidimensionnel défini en Section 6.1.

8.3.1 Expression de la fraction condensée en terme de longueurs de cycle

Le nombre de bosons dans le condensat s'écrit :

$$N_0 =< 0|\hat{\rho}^{(1)}|0 >= \frac{1}{N}\int dXdX'\psi_0^*(X)\psi_0(X')\rho^{(1)}(X,X',\beta),$$

où $\rho^{(1)}(X,X',\beta)$ est le coefficient en représentation spatiale de la matrice densité réduite à une particule. Pour un gaz sans interaction la matrice densité réduite à une particule s'écrit :

$$\rho^{(1)}(X,X',\beta) = \sum_{k=1}^{N}\frac{Z_{N-k}}{Z_N}\rho_1^{q2d}(X,X',k\beta).$$

Pour le piège quasi-bidimensionnel, la matrice densité s'exprime comme le produit des matrices densité pour chacune des dimensions du système :

$$\rho_1^{q2d}(X,X',\beta) = \rho_1^{1d}(x,x',\beta,\omega)\rho_1^{1d}(y,y',\beta,\omega)\rho_1^{1d}(z,z',\beta,\omega_z).$$

Ces trois équations donnent la fraction condensée :

$$\frac{N_0}{N} = \sum_{k=1}^{N}\frac{Z_{N-k}z_k}{NZ_N}R_k.$$

avec

$$R_k = \frac{1}{z_k}\int dXdX'\psi_0^*(X)\psi_0(X')\rho_1^{q2d}(X,X',k\beta) = (1-e^{-k\beta\hbar\omega})^2(1-e^{-k\beta\hbar\omega_z}).$$

En tenant compte de la condition Eq. (6.2), la fonction de coupure s'écrit :

$$R_k = (1-e^{-k\beta\delta/\sqrt{N}})^2(1-e^{-k\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi}).$$

8.3.2 Démonstration du théorème

$$\text{Théorème :}\quad \lim_{N\to\infty}\left(\frac{N_0}{N} - \sum_{k=\sqrt{N}}^{N}\pi_k\right) = 0. \tag{8.5}$$

La démonstration de ce théorème fait appel aux valeurs asymptotiques de la fonction de coupure R_k, ainsi que de la distribution des cycles π_k.

Si $k\beta\hbar\omega \ll 1$ c'est-à-dire $k \ll \delta\sqrt{N}$ alors $R_k \sim \frac{(k\beta\delta)^2}{N}(1 - e^{-k\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi})$.

Si $k\beta\hbar\omega \gg 1$ c'est-à-dire $k \gg \delta\sqrt{N}$ alors $1 - R_k \sim 2e^{-k\beta\delta/\sqrt{N}}$ donc $R_k \sim 1$.

Si $k\beta\hbar\omega \ll 1$ c'est-à-dire $k \ll \sqrt{N}$ alors $\pi_k^{q2d} \sim \frac{1}{(k\beta\delta)^2}\frac{1}{1 - e^{-k\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi}}$.

Si $k\beta\hbar\omega \gg 1$ c'est-à-dire $k \gg \sqrt{N}$ alors $\pi_k^{q2d} \sim \frac{1}{N}\mathbf{1}_{k\leq N_0}$.

Pour le système quasi-bidimensionnel, les conditions (a) à (i) de la Section 3.2 sont vérifiées, avec $D = 2$. En effet, les conditions a,b,d,e,f et h ne posent pas de problème. La condition c est vérifiée car :

$$\pi_{\sqrt{N}} = \frac{Z_{N-\sqrt{N}}}{Z_N}\frac{z_{\sqrt{N}}}{N} \leq \frac{1}{N}\frac{1}{(1 - e^{-\delta\beta})^2}\frac{1}{1 - e^{-\sqrt{N}\beta\delta\tilde{\omega}_z\sqrt{6}/\pi}} \sim \frac{1}{N}\frac{1}{(1 - e^{-\delta\beta})^2} \tag{8.6}$$

Et la condition g devient
g'- $R_{\sqrt{N}}$ est équivalent à une quantité qui ne dépend pas de N·
car $R_{\sqrt{N}} \sim (1 - e^{-\beta\delta})^2$.
Ainsi, la même démonstration que pour le piège bidimensionnel s'applique. C'est-à-dire la même démonstration que pour le gaz idéal homogène en trois dimensions (Section 3.1.4), en remplaçant L^2 par $\sqrt{N}$. Donc le théorème Eq. (8.5) est vrai.

8.4 Calcul de la fugacité du gaz idéal homogène bidimensionnel

La fugacité s'exprime en fonction du potentiel chimique comme :

$$z = e^{\beta\mu},$$

où $\beta = 1/(k_B T)$, et k_B est la constante de Boltzmann.

Le potentiel chimique correspond à l'énergie qui serait nécessaire pour ajouter une particule au système étudié. Il dépend du système en question, du nombre de particules déjà présentes, et de la température, par la relation :

$$N = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1}. \tag{8.7}$$

Pour le cas du gaz idéal dans une boîte bidimensionnelle de surface L^2 avec des limites périodiques, les niveaux d'énergies sont :

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2\pi^2 n^2}{L^2},$$

où $n = (n_x, n_y)$.

Dans le cas bidimensionnel, l'équation 8.7 devient :

$$\frac{1}{V}\sum_{\epsilon}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon}-1} = \eta$$
$$\frac{1}{L^2}\sum_{n_x=-\infty}^{+\infty}\sum_{n_y=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta 2\pi^2(n_x^2+n_y^2)/L^2}-1} = \eta.$$

À la limite thermodynamique, on reconnaît une somme de Riemann. Après passage en coordonnées polaires, cette équation devient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}dy\frac{1}{z^{-1}e^{\beta 2\pi^2(x^2+y^2)}-1} = \eta$$
$$\int_{0}^{+\infty}2\pi r dr\frac{1}{z^{-1}e^{\beta 2\pi^2 r^2}-1} = \eta$$
$$\frac{1}{2\pi\beta}\ln\left(\frac{1}{1-z}\right) = \eta.$$

À la limite thermodynamique, la fugacité pour un gaz idéal homogène bidimensionnel est donc :

$$\lim_{\text{thermo}} z = 1 - e^{-2\pi\beta\eta}. \tag{8.8}$$

Bibliographie

[1] S. N. Bose, Z. Physics **26** (1924) 178.

[2] A. Einstein, Berl. Ber. **22** 261 (1924), Berl. Ber. **23** 3 (1925), Berl. Ber. **23** 18 (1925).

[3] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman and E. A. Cornell, 1995, Science **269**, 198.

[4] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).

[5] Bradley, C. C. and Sackett, C. A. and Tollett, J. J. and Hulet, R. G., Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).

[6] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, and J. Dalibard, *Nature* **441**, 1118 (2006).

[7] P. Krüger, Z. Hadzibabic, and J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 040402 (2007).

[8] M. Holzmann and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 190402 (2008).

[9] R. P. Feynman, Phys. Rev. **90**, 1116 (1953).

[10] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Addison-Wesley, New York, 1972).

[11] W. Krauth, *Statistical Mechanics : Algorithms and Computations* (Oxford University Press, Oxford, 2006).

[12] V. Goncharov, C. R. Acad. Sci. URSS (N.S) **35**, 267 (1942).

[13] L. A. Shepp and S. P. Lloyd, Trans. Amer. Math. Soc. **121**, 340 (1966).

[14] O. Penrose and L.Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956)

[15] H. F. Trotter, Proc. Am. Math. Soc. **10**, 545 (1959).

[16] G.B. Hess and W. M. Fairbank, Phys. Rev. Lett. **19**, 216-218 (1967).

[17] E. L. Pollock and D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **36**, 8343 (1987).

[18] A. J. Leggett, Physica Fennica **8**, 125 (1973).

[19] D. M. Ceperley, Path-integrals in the theory of condensed helium, Rev. Mod. Phys. **67**, 279-355.

[20] M. Holzmann and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **83**, 2687 (1999).

[21] W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3695 (1996) ; M. Holzmann and Y. Castin, *Eur. Phys. J. D* **7**, 425 (1999).

[22] D. Ueltschi, J. Math. Phys. **47**, 123303 (2006).

[23] D. Ueltschi, Phys. Rev. Lett. **97**, 170601 (2006).

[24] G. Benfatto, M. Cassandro, I. Merola, and E. Presutti, J. Math. Phys. **46**, 033303 (2005).

[25] A. Suto, J. Phys. A : Math Gen 35, 6995 (2002).

[26] See appendix E of P. T. Landsberg, *Thermodynamics, with quantum statistical illustrations* (Interscience, New York, 1961).

[27] M. Chevallier, W. Krauth, *Phys. Rev. E* **76** 051109 (2007).

[28] N. Bogoliubov, J. Phys. (Moscow) **11**, 23 (1947).

[29] F. London, The λ-phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy, Nature 141, 644 (1938).

[30] W. J. Mullin, J. Low Temp. Phys. **106**, 615 (1997).

[31] Alan Hammond, communication privée (2009).

[32] Merci à Philippe Lecheminant pour cette précision (2009).

[33] V. Bagnato and D. Kleppner, *Phys. Rev. A* **44**, 7439 (1991).

[34] P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, 383 (1967).

[35] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973) ; J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **7**, 1046 (1974) ; V. L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **32**, 493 (1971) ; **34**, 610 (1972)

[36] W. J. Mullin, J. Low Temp. Phys. **110**, 167 (1998).

[37] M. D. Girardeau, J. Math. Phys. **1**, 516 (1960).

[38] I. Bouchoule, K. V. Kheruntsyan and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. A **75**, 031606(R) (2007).

[39] Cladé, Phys. Rev. Lett. **102** , 170401 (2009).

[40] M.Holzmann, M. Chevallier and W. Krauth, Europhys. Lett **82**, 30001.

[41] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics Vol 5 Course of Theoretical physics*, Butterworth-Heinemann (Oxford), Chap. 56, page 162 (1980).

[42] Z.Hadzibabic, P.Krüger, M.Cheneau, S.P.Rath, and J.Dalibard, New.J. Phys. **10**, 045006 (2008)

[43] R. N. Bisset, D. Baillie and P.B. Blakie, Phys. Rev. A **79**, 013602.

[44] M.Holzmann, M. Chevallier and W. Krauth, en préparation (2009).

[45] Yu. Kagan, B. Svistunov, and G. V. Shlyapnikov, Sov. Phys. JETP **66**, 314 (1987)

[46] N. Prokof'ev, O. Ruebenacker, and B. Svistunov, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 270402 (2001).

[47] D. S. Petrov, M. Holzmann, and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2551 (2000)

.

9 Publications

Première publication : *Off-diagonal long-range order, cycle probabilities, and condensate fraction in the ideal Bose gas* M. Chevallier, W. Krauth, *Phys. Rev. E* 76 051109 (2007).

Dans cet article, nous présentons des résultats sur le gaz de Bose, et la statistique des longueurs de cycles dans les permutations.

Nous montrons de manière élémentaire et explicite le théorème suivant :

$$\lim_{N\to\infty}\left(\frac{N_0}{N}-\sum_{k=L^2}^{N}\pi_k\right)=0 \quad \text{avec} \quad \frac{N_0}{N}=\lim_{|r-r'|\to\infty}\rho^{(1)}(r,r',\beta) \tag{9.1}$$

en dimension trois, pour un gaz de Bose idéal uniforme. Ce théorème signifie qu'à la limite thermodynamique, le paramètre d'ordre non diagonal à longue portée est égal à la somme des poids statistiques des cycles de taille supérieure à L^2. Ainsi, nous montrons que dans ce système la définition de la condensation de Bose–Einstein de Penrose et Onsager coïncide avec celle de Feynmann, en terme de longueur de cycles.

Ensuite, nous spécifions l'allure de la distribution des longueurs de cycles pour le gaz idéal. Pour cela, nous utilisons la formule qui lie la dérivée discrète de la distribution des longueurs de cycles π_k avec la distribution du nombre de bosons dans le condensat. Ceci permet d'expliquer l'apparition d'un plateau sur la courbe des π_k. Cette étude confirme que pour le gaz idéal tridimensionnel, la somme des probabilités des cycles de longueur supérieure à L^2 donne la fraction condensée, alors que la somme des probabilités des cycles de longueur inférieure à L^2 donne la fraction de bosons dans les états excités.

Nous nous sommes ensuite intéressés à la distribution de la longueur du cycle le plus long, d'abord à température nulle, puis à température quelconque inférieure à la température critique. Ceci nous a permis de conclure sur une relation de proportionalité entre la longueur moyenne du cycle le plus long et le nombre de bosons dans le condensat. Cette partie est en lien avec l'étude des permutations aléatoires.

Nous concluons sur quelques remarques sur le gaz en interaction.

Off-diagonal long-range order, cycle probabilities, and condensate fraction in the ideal Bose gas

Maguelonne Chevallier* and Werner Krauth†

CNRS-Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure; 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

(Received 15 February 2007; revised manuscript received 28 June 2007; published 9 November 2007)

We discuss the relationship between the cycle probabilities in the path-integral representation of the ideal Bose gas, off-diagonal long-range order, and Bose-Einstein condensation. Starting from the Landsberg recursion relation for the canonic partition function, we use elementary considerations to show that in a box of size L^3 the sum of the cycle probabilities of length $k \gg L^2$ equals the off-diagonal long-range order parameter in the thermodynamic limit. For arbitrary systems of ideal bosons, the integer derivative of the cycle probabilities is related to the probability of condensing k bosons. We use this relation to derive the precise form of the π_k in the thermodynamic limit. We also determine the function π_k for arbitrary systems. Furthermore, we use the cycle probabilities to compute the probability distribution of the maximum-length cycles both at $T=0$, where the ideal Bose gas reduces to the study of random permutations, and at finite temperature. We close with comments on the cycle probabilities in interacting Bose gases.

DOI: 10.1103/PhysRevE.76.051109 PACS number(s): 05.30.Jp

I. INTRODUCTION

The canonic partition function of N ideal bosons in a system with energy levels $\epsilon_0=0<\epsilon_1<\cdots$ at inverse temperature $\beta=1/(k_B T)$ is given by

$$Z_N = \left[\prod_\sigma \sum_{n_\sigma=0}^{N} \right] \exp\left(-\beta \sum_\sigma n_\sigma \epsilon_\sigma \right) \delta_{\Sigma_\sigma n_\sigma, N}. \tag{1}$$

For each state σ, the allowed occupation numbers n_σ go from 0 to N, and the Kronecker δ function enforces the total number of particles to be N.

The Feynman path-integral [1] represents Z_N as a trace over the diagonal density matrix ρ^{bos},

$$Z_N = \int dx_1 \cdots dx_N \rho^{\text{bos}}[\{x_1, \ldots, x_N\}, \{x_1, \ldots, x_N\}, \beta],$$

which is given in terms of the $N!$ permutations P of the distinguishable-particle density matrix ρ,

$$\rho^{\text{bos}}[\{x_1, \ldots, x_N\}, \{x'_1, \ldots, x'_N\}, \beta] = \frac{1}{N!} \sum_P \rho[\{x_1, \ldots, x_N\}, \{x'_{P_1}, \ldots, x'_{P_N}\}, \beta]. \tag{2}$$

Thus the partition function is a sum of $N!$ permutation-dependent terms, $Z_N=\Sigma_P Z_P$, and it is possible to define the probability of a permutation P as

$$\pi_P = \frac{Z_P}{Z_N}. \tag{3}$$

Permutations can be broken up into cycles, and one may also define cycle probabilities:

$$\pi_k = \frac{1}{Z_N} \sum_{P \in \{N,k\}} Z_P, \tag{4}$$

where $\{N,k\}$ denotes the set of all permutations where the particle N belongs to a cycle of length k. The choice of the particle N in Eq. (4) is arbitrary.

In this paper, we are concerned with the characterization of the cycle probabilities π_k in the ideal Bose gas and with their relation to quantities characterizing Bose-Einstein condensation, namely the off-diagonal long-range order (in Sec. III, see also Refs. [2,3]) and the condensate fraction (in Sec. IV). In fact, for arbitrary finite systems of ideal bosons, the discrete derivative of the function π_k yields the probabilities for condensing k bosons [4]. This relation between the cycle statistics and the condensate fraction has not been scrutinized before in detail. It allows us to determine the π_k from the known fluctuation properties of the ideal Bose gas. It is also possible, and very instructive, to compute the cycle probabilities π_k directly via the infinite-density limit of a finite Bose gas (see Sec. V). Furthermore, we will exploit some of the subtleties of the concept of cycle probabilities to compute the probability distribution of the maximum-length cycle at zero temperature, where the problem reduces to a study of random permutations [5]. Our preceding analysis of the π_k allows us to understand why this distribution is essentially unchanged at finite temperature, below the condensation temperature (Sec. VI). Finally, we briefly review some known relations between Bose condensation and the presence of infinite cycles for interacting Bose gases (Sec. VII).

II. RECURSION RELATIONS FOR THE PARTITION FUNCTION AND THE DENSITY MATRIX

The Landsberg recursion relation [6] gives Z_N as a sum of only N terms,

$$Z_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} Z_{N-k} z_k, \tag{5}$$

where the $z_k=Z_1(k\beta)=\Sigma_\sigma \exp(-k\beta\epsilon_\sigma)$ are the single-particle partition functions at inverse temperature $k\beta$. In fact, the

*maguelonne.chevallier@ens.fr
†werner.krauth@ens.fr

 ©2007 The American Physical Society

terms appearing in Eq. (5) are the cycle probabilities:

$$\pi_k = Z_{N-k} z_k / (N Z_N). \tag{6}$$

This is because k particles on a permutation cycle of length k at inverse temperature β have the same statistical weight z_k as a single particle at inverse temperature $k\beta$ and, furthermore, in the ideal Bose gas, the different cycles of a permutation are statistically independent. Thus in Eq. (6), the cycle contributes z_k, and the remaining $N-k$ particles contribute Z_{N-k} (see Ref. [7]).

The off-diagonal single-particle density matrix,

$$\rho_N(r,r',\beta) = \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \times \rho^{\mathrm{bos}}[\{x_1,\ldots,x_{N-1},r\},\{x_1,\ldots,x_{N-1},r'\},\beta],$$

is also a sum of permutation-dependent terms, and the Landsberg recursion relation can be generalized to a nondiagonal single-particle density matrix $\rho(r,r',k\beta)$ rather than to the diagonal one:

$$\rho_N(r,r',\beta) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} Z_{N-k}\rho(r,r',k\beta), \tag{7}$$

$$\frac{V}{Z_N}\rho_N(r,r',\beta) = \sum_{k=1}^{N} \pi_k R_k^{\mathrm{cut}}(r,r'), \tag{8}$$

where V is the volume of the system. In Eq. (8), the cycle probabilities π_k are modified by the cutoff function $R_k^{\mathrm{cut}}(r,r')$, which is proportional to the ratio of the off-diagonal and the diagonal density matrices. In the three-dimensional homogeneous Bose gas in a periodic cubic box of size L^3, we have $R_k^{\mathrm{cut}}(r,r') = L^3\rho(r,r',k\beta)/z_k = \rho(0,r-r',k\beta)/\rho(0,0,k\beta)$.

As is well known, the condensate fraction is proportional to the off-diagonal single-particle density matrix in the limit $|r-r'|\to\infty$, a case that corresponds to $|r-r'|\propto L$ in a cubic box of length L for $L\to\infty$. The cutoff function then vanishes for small k, and terms with $k \gg \frac{L^2}{2\beta}$ dominate the sum in Eq. (8) [8].

III. OFF-DIAGONAL LONG-RANGE ORDER AND CYCLE PROBABILITIES

In this section, we discuss a relation between the off-diagonal long-range order parameter and the sum of cycle probabilities for the homogeneous Bose gas, with unit mass and particle density $[m=\hbar=1,\ N=L^3, T_c = 2\pi/\zeta(3/2)^{2/3}]$. To analyze Eq. (8), we notice that $z_k \sim 1$ for $k \gg \frac{L^2}{2\beta}$ and $z_k \sim L^3/(2\pi\beta k)^{3/2}$ for $k \ll \frac{L^2}{2\beta}$. It follows from $Z_{N-k} < Z_N$ that

$$\pi_k \lesssim \begin{cases} 1/(2\pi\beta k)^{3/2} & \text{for } k \ll \dfrac{L^2}{2\beta} \\ 1/N & \text{for } k \gg \dfrac{L^2}{2\beta}. \end{cases} \tag{9}$$

We now study the cutoff function $R_k^{\mathrm{cut}}(r,r')$ for $|r-r'| \propto L$. For concreteness, we suppose that the vector $r-r'$ has the same components in all three space directions: $r-r' = L(\delta,\delta,\delta)$ with $0<\delta<\frac{1}{2}$ and denote the corresponding cutoff function and the off-diagonal density matrix by $R_k^{\mathrm{cut}}(\delta)$ and by $\rho_N(\delta)$, respectively. We have

$$R_k^{\mathrm{cut}}(\delta) = \left[\frac{\sum_{w\in\mathbb{Z}} e^{-(\delta+w)^2 L^2/(2k\beta)}}{\sum_{w\in\mathbb{Z}} e^{-w^2 L^2/(2k\beta)}} \right]^3.$$

For $k \gg \frac{L^2}{2\beta}$, both the numerator and the denominator are $\sim\sqrt{2\pi\beta k}/L$, so that $R_k^{\mathrm{cut}}(\delta)\sim 1$. For $k \ll \frac{L^2}{2\beta}$, the numerator is $\sim\exp\{-3\delta^2 L^2/(2\beta k)\}$, and the denominator is ~ 1. This shows that the monotonic function $R_k^{\mathrm{cut}}(\delta)$ is exponentially small for $k \ll \frac{L^2}{2\beta}$ and equal to unity for $k \gg \frac{L^2}{2\beta}$ (see Fig. 1). The estimates for R_k^{cut} and for π_k imply

$$\lim_{L\to\infty} \sum_{k=1}^{L^2} \pi_k R_k^{\mathrm{cut}}(\delta) = 0,$$

$$\lim_{L\to\infty} \sum_{k=L^2}^{N} \pi_k [1 - R_k^{\mathrm{cut}}(\delta)] = 0. \tag{10}$$

(see the Appendix for a short, but rigorous derivation). It follows that

$$\lim_{L\to\infty} \left[\frac{L^3\rho_N(\delta)}{Z_N} - \sum_{k=\mathrm{const}L^2}^{N} \pi_k \right] = 0. \tag{11}$$

This equation relates the probabilities of infinite cycles to off-diagonal long-range order and [because $\lim_{|r-r'|\to\infty} \frac{V}{Z_N}\rho_N(r,r',\beta)$ gives the condensate fraction] also to the condensate fraction. The relation between cycle lengths and off-diagonal long-range order is natural because, in order for a cycle to contribute to the off-diagonal density matrix for $|r-r'|\propto L$, its de Broglie wavelength must be at least comparable to the distance L, which means that the particle must belong to a cycle of length k with $L \lesssim \sqrt{2\pi k\beta}$ (see also Refs. [2,9] for related derivations).

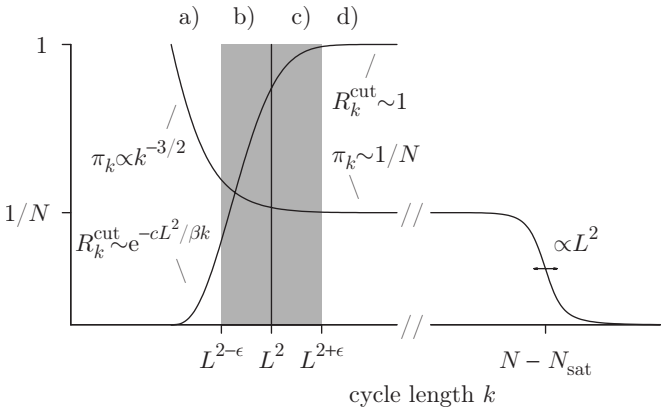


FIG. 1. Cycle probabilities π_k and cutoff function R_k^{cut} for a periodic box of size L^3 below T_c.

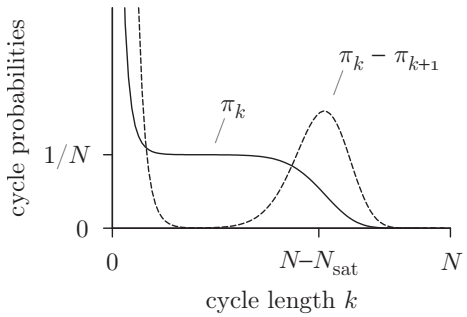


FIG. 2. Cycle probabilities π_k and their negative discrete derivative (not to scale) for $N=125$ ideal bosons in a periodic box of size $L^3=5^3$ at temperature $T/T_c=0.5$ ($N_{\rm sat}=48.7$).

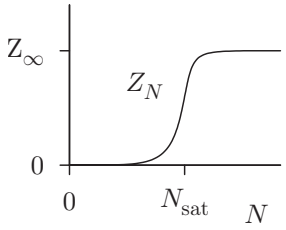


FIG. 3. Canonic partition function Z_N as a function of N in a finite system.

IV. CONDENSATE FRACTION AS A DERIVATIVE OF THE CYCLE PROBABILITIES

In Sec. III, we studied the sum of the cycle probabilities. We now discuss the fact that the discrete derivative of the cycle probabilities exactly gives the condensation probabilities. This relation allows us to compute the π_k, and it involves neither a cutoff function nor the thermodynamic limit and holds for arbitrary systems of ideal bosons. The relation was mentioned very briefly in the context of Monte Carlo calculations [4], but it was not analyzed in any detail.

Let us define $S_N(k,\sigma)$ as the canonic partition function with N bosons of which exactly k are in state σ (see Ref. [6]) and, similarly, the restricted partition function with at least k bosons in the state σ, as

$$Y_N(k,\sigma) = \sum_{k'=k}^{N} S_N(k',\sigma) = e^{-\beta k \epsilon_\sigma} Z_{N-k}. \tag{12}$$

[$S_N(k,\sigma)/Z_N$ is the probability of having exactly k bosons in state σ.] Summing Eq. (12) over all states σ, and dividing by NZ_N, we recover the cycle probabilities,

$$\frac{1}{NZ_N}\sum_\sigma Y_N(k,\sigma) = \frac{\sum_\sigma e^{-\beta k \epsilon_\sigma}}{NZ_N} Z_{N-k} = \pi_k,$$

whose negative discrete derivative,

$$\pi_k - \pi_{k+1} = \sum_\sigma S_N(k,\sigma)/(NZ_N), \tag{13}$$

thus yields the sum over all σ of the probabilities of condensing k bosons into state σ. We note that the left-hand side of Eq. (13) contains only quantities related to the path-integral picture, whereas the right-hand side involves only energy levels. Furthermore, we note that the probability of condensing k particles into excited levels is zero for large k, so that Eq. (13) effectively relates the ground-state condensation probabilities to the derivative of the cycle probabilities.

To illustrate the relation between cycles and condensation probabilities, we consider the example of Fig. 2 of N particles in a periodic box, with the cycle probabilities explicitly computed from the Landsberg recursion relation. For $k > N/2$, the derivative of the cycle probabilities equals the sum of the probabilities of condensing k bosons into state σ. More generally, for $k \gg \frac{L^2}{2\beta}$, the condensation probabilities into the excited states vanish and $\pi_k - \pi_{k+1} \sim S_N(k,0)/(NZ_N)$ directly yields the probability distribution of having k particles in the ground state, a distribution with mean value $k = \langle N_0 \rangle$ and standard deviation $\propto L^2$. On the other hand, for small k, as already discussed, the discrete derivative behaves as $k^{-5/2}$. It describes the probabilities of condensing k bosons into excited states. Finally, for $\frac{L^2}{2\beta} \ll k$ and $k \leqslant \langle N_0 \rangle - L^2/(2\pi\beta)^{3/2}$, the probability of having k particles in the condensate vanishes, so that the π_k are constant.

V. DIRECT CALCULATION OF CYCLE PROBABILITIES

We have seen in Sec. IV that the cycle probabilities π_k follow from the known fluctuations of the condensate in the canonic ensemble. It is very instructive to compute them directly via the infinite-density limit for the partition function of an arbitrary system. For $k \gg \frac{L^2}{2\beta}$, we have $z_k \sim 1$, so that $\pi_k \sim Z_{N-k}/Z_N$. For illustration, the Fig. 3 shows the Z_k in a fixed physical system (for the homogeneous Bose gas, in a fixed box of size L^3), as it can be computed numerically from the Landsberg recursion relation. The limiting value Z_∞ (at infinite density) and the value $k=N_{\rm sat}$ of largest variation of Z_k can be computed exactly.

Indeed, as the ground-state energy is zero, Z_N differs from Z_{N-1} only by configurations without any particle in the ground state: $Z_N - Z_{N-1} = S_N(0,0)$ [see above Eq. (12)]. Therefore $Z_N = \Sigma_{k=1}^N S_k(0,0)$ with

$$S_k(0,0) = \left[\prod_{\sigma>0}\sum_{n_\sigma=0}^{\infty}\right] \exp\left(-\beta \sum_{\sigma>0} n_\sigma \epsilon_\sigma\right) \delta_{\Sigma_{\sigma>0} n_\sigma, k}.$$

Summing this equation over all integers k yields, for arbitrary states $\{\epsilon_\sigma\}$,

$$Z_\infty = \prod_{\sigma>0} \frac{1}{1-\exp(-\beta\epsilon_\sigma)} = \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{z_k - 1}{k}\right). \tag{14}$$

This exact formula for a finite canonical Bose system can be obtained without the usual saddle-point integration. It agrees with the grand-canonical partition function for the excited states at zero chemical potential because at high density the condensate serves as a reservoir for the excited bosons.

To determine the value of N for which the partition function Z_k passes from $Z_k \sim 0$ to $Z_k \sim Z_\infty$ (see Fig. 3), we again

take a discrete derivative and consider the probability distribution of the number of excited particles,

$$\pi_\infty(N_{\rm exc}=k)=(Z_k-Z_{k-1})/Z_\infty,$$

whose mean value, the saturation number, is

$$N_{\rm sat}=\langle N_{\rm exc}\rangle=\sum_{k=1}^{\infty}k\pi_\infty(N_{\rm exc}=k)=\sum_{\sigma>0}\frac{\exp(-\beta\epsilon_\sigma)}{1-\exp(-\beta\epsilon_\sigma)}$$
$$=\sum_{k=1}^{\infty}(z_k-1). \tag{15}$$

The variance of the number of excited particles is again given exactly by the corresponding grand-canonical expressions

$$\langle N_{\rm exc}^2\rangle-\langle N_{\rm exc}\rangle^2=\sum_{\sigma>0}\frac{1}{\exp(\beta\epsilon_\sigma)-1}+\frac{1}{[\exp(\beta\epsilon_\sigma)-1]^2}$$
$$=N_{\rm sat}+\sum_{k=2}^{\infty}(k-1)(z_k-1). \tag{16}$$

For completeness, we give the expressions corresponding to Eqs. (14)–(16) in the homogeneous Bose gas, in the limit $L\to\infty$: $Z_\infty\sim\exp[L^3/(2\pi\beta)^{-5/2}\zeta(5/2)]$ and, furthermore, $N_{\rm sat}/L^3\sim\zeta(3/2)/(2\pi\beta)^{3/2}=\eta_c$, with η_c the critical density. In addition, the variance of $N_{\rm exc}$ behaves as $L^4/(2\pi\beta)^3$ [10], so that the jump of Z_k/Z_N from 0 to 1, for $T<T_c$, takes place in a window of width L^2, as already noted in Sec. IV.

Putting together the analysis of Z_k for a fixed size of the system and a varying particle number, and our knowledge of z_k, we have a complete description of the cycle probabilities π_k. Once we know exactly the behavior of the π_k in the thermodynamic limit, we observe that the sum of the π_k for $k\ll\frac{L^2}{2\beta}$ gives exactly the critical density η_c, and the sum of the π_k for $k\gg\frac{L^2}{2\beta}$ gives the condensate fraction. This conclusion is the same as in Sec. III, but it stems from a microscopic analysis of the cycle probabilities.

VI. MAXIMUM CYCLE LENGTHS

At finite temperature, the cycle probabilities π_k are easily computed from the Landsberg recursion relation, and at $T=0$, they are given by $\pi_k=1/N$. In Monte Carlo calculations the entire permutation of N elements can be sampled, starting from the cycle containing the element N, which has length k with probability π_k. This leaves one with a system of $N-k$ particles, for which the probabilities of the cycle containing element $(N-k)$ can again be computed, etc. (see Ref. [7]). [At zero temperature, the distribution remains $\pi_k=1/(N-k)$, at finite temperature, it is given by Eq. (6).]

In this section, we use the cycle probabilities π_k to obtain analytical results for $p_k^{\max}$, the probability that the longest cycle in a permutation has length k. This probability distribution is closely related to the distribution π_k both at finite temperature and at $T=0$, where the ideal Bose gas is equivalent to the problem of random permutations, which has been much studied in the mathematics literature. We recover some classic results which we generalize to finite temperatures.

We first note that the cycle probabilities are related to the mean number of cycles of length k, $\tilde{\pi}_k=N\pi_k/k$. For $k>N/2$, $\tilde{\pi}_k$ coincides with the probability p_k that the permutation P has at least one cycle of length k. This is simply because a permutation of N elements can have no more than one such cycle, in other words, because

$$\tilde{\pi}_k=\sum_{m=1}^{\infty}m\times\left\{\begin{array}{c}\text{prob. to have}\\ m\text{ cycles of length }k\end{array}\right\} \tag{17}$$

and

$$p_k=\sum_{m=1}^{\infty}\left\{\begin{array}{c}\text{prob. to have}\\ m\text{ cycles of length }k\end{array}\right\} \tag{18}$$

and only terms with $m=1$ contribute to the above expressions if $k>N/2$.

Furthermore, any cycle of length $k>N/2$ must be the longest cycle, so that we arrive for all temperatures at

$$p_k^{\max}=p_k=\tilde{\pi}_k=N\pi_k/k\quad\text{for } k>N/2,\ \forall\ T. \tag{19}$$

We next consider the probability distributions p_k and $p_k^{\max}$ for $k\leqslant N/2$ at $T=0$, for $N\to\infty$. We take the continuum limit $p_k\to p(x)$ by setting $p_k=\frac{1}{N}p(x=k/N)$ [and similarly for $p^{\max}(x)$ and $\tilde{\pi}(x)$].

It follows from the recursive procedure, and from the fact that the π_k are of order $1/N$, that the probability to have more than one cycle of the same length is $O(1/N^2)$. In the limit $N\to\infty$, we see that $p(x)=\tilde{\pi}(x)=1/x$.

For $x<1/2$, the probability $p^{\max}(x)$ is the product of the probability to sample x, and the probability that x remains the longest cycle in the remaining partition of length $1-x$, in other words,

$$p^{\max}(x)=p(x)\left(1-\left\{\begin{array}{c}\text{prob. that longest cycle in}\\ [0,1-x]\text{ is}>x\end{array}\right\}\right)$$

At $T=0$, and in the limit $N\to\infty$, the probability that in a permutation of length $N(1-x)$ the longest cycle's length exceeds Nx equals the probability that in a permutation of N elements the longest cycle exceeds $x/(1-x)$, and we arrive at

$$p^{\max}(x)=p(x)\left[1-\int_{x/(1-x)}^{1}dx'\,p^{\max}(x')\right]. \tag{20}$$

For all $x\in]0,1[$, $x<x/(1-x)$, so Eq. (20) can be used to compute $p^{\max}(x)$ from $x=1$ downwards to arbitrary precision (see Fig. 4). Alternatively, we can transform Eq. (20) into a differential equation

$$\frac{d}{dx}p^{\max}(x)=-\frac{1}{x}p^{\max}(x)+\frac{1}{x(1-x)^2}p^{\max}\left(\frac{x}{1-x}\right).$$

Explicit formulas for $p^{\max}(x)$ are easily obtained, starting by inputting, from Eq. (19), $p^{\max}(x)$ for $\frac{1}{2}<x<1$ to obtain $p^{\max}$ in the window $x\in[\frac{1}{3},\frac{1}{2}]$, etc.,

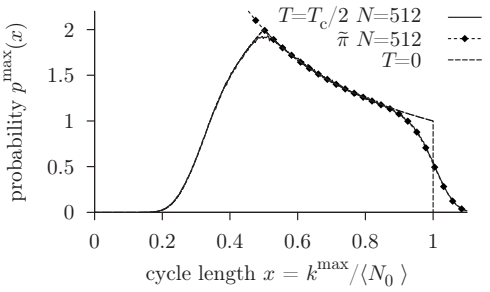


FIG. 4. Probability $p^{\max}(x)$ from a numerical integration of Eq. (20) at $T=0$, compared to the distribution $p_k^{\max}$ obtained from a Monte Carlo sampling at $T=T_c/2$, and the exact expression of Eq. (19) for large x, at $T=T_c/2$.

$$p^{\max}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{x} & \text{for } \dfrac{1}{2} < x \\ \dfrac{1}{x}\left[1 - \ln\left(\dfrac{1-x}{x}\right)\right] & \text{for } \dfrac{1}{3} < x < \dfrac{1}{2}, \end{cases}$$

but they become cumbersome (see also Ref. [11]).

At finite temperature, the cycle of the element N is sampled from a distribution π_k as shown in Fig. 2 rather than from the flat distribution. However, the longest cycle is again of length $\propto N$, and it is sampled from an essentially constant distribution in the interval $x \in [0, \langle N_0 \rangle / N]$. In the thermodynamic limit, for $T < T_c$, the distribution $p^{\max}(x)$ of the properly rescaled variable $x = k^{\max}/\langle N_0 \rangle$ trivially agrees with the one obtained at $T=0$. In particular, the mean length of the longest cycle is given by $0.624\langle N_0 \rangle$ at all temperatures $T < T_c$ [5]. At sufficiently low temperature, the rounding at $x \simeq 1$ is *exactly* described by Eq. (19) (see Fig. 4).

VII. INTERACTING BOSE GAS

For the interacting Bose gas, the relation between off-diagonal long-range order and the infinite cycles has been studied for generalized mean-field models ([2,12]), where it was shown that Bose-Einstein condensation and finite density of particles belonging to infinite cycles are equivalent. But it has not been possible to establish analogous rigorous results for models with realistic interactions. In the general case, the definition of the superfluid density in terms of the winding numbers [13] proves that for the homogeneous Bose gas in three dimensions, the presence of infinite cycles is equivalent to a nonzero superfluid density. It is generally admitted that in homogeneous systems, Bose-Einstein condensation implies superfluidity, so that the presence of a condensate would imply the existence of infinite cycles in those systems.

On the other hand, the question whether superfluidity implies Bose-Einstein condensation for homogeneous bosonic quantum systems (above two dimensions) has no rigorous answer. (We note that two-dimensional superfluids are not Bose condensed.) In three dimensions, empirical evidence points to the direct link between superfluidity in homogeneous superfluid systems and Bose-Einstein condensation, but a proof that superfluidity implies Bose-Einstein condensation is still lacking. This is related to the curious difficulty, pointed out for example in Ref. [14], to rigorously prove the existence of Bose-Einstein condensation for interacting systems.

In any case, the direct link between the cycle probabilities and the condensate fraction, as described in Sec. IV, cannot hold for interacting systems. This is easily seen at $T=0$ because the ground state of any system of identical but distinguishable particles has bosonic symmetry. Therefore the distinguishable-particle density matrix

$$\rho[\{x_1, \ldots, x_N\}, \{x_{P_1}, \ldots, x_{P_N}\}, \beta = \infty]$$

is independent of the permutation P. It follows that at $T=0$, and for finite N, all permutations have the same weight and the cycle probabilities again satisfy $\pi_k = \frac{1}{N}$. At the same time, the condensate fraction of interacting systems at $T=0$ is less than 1 [15], and the distribution of the π_k cannot be related to the distribution of N_0 in the same manner as in the ideal Bose gas.

VIII. CONCLUSION

In conclusion, we have discussed the relation between the off-diagonal long-range order, the condensate fraction, and the cycle probabilities in the ideal Bose gas. Only long cycles ($k > \text{const}\, L^2$ in the homogeneous case) contribute to the off-diagonal long-range order parameter, and Bose Einstein condensation is equivalent to the presence of infinite cycles. We have also discussed the probability distribution for long cycles, and the general, nonintuitive, link between the integer derivative of the cycle probabilities and the number of condensed bosons. This integer derivative provides us with a purely topological characterization of the condensate fraction in the ideal Bose gas. Our knowledge of the cycle probabilities allows us to study the distribution of the longest cycle. We have remarked that the $0 < T < T_c$ case can be understand from the $T=0$ case. The mean length of the longest cycle is proportional to the number of condensed bosons. For the interacting Bose gas, at the present time, only the winding-number formula [13] has been rigorously shown to relate the topology of Feynman paths to another characteristic of interacting Bose-condensed systems, namely the superfluid density. The link between Bose-Einstein condensation and superfluidity is not clearly elucidated [14] and it will need to be explored further in order to better understand the cycles of the interacting Bose gas.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank A. Comtet and S. N. Majumdar for an inspiring discussion about maximum cycle length (see also Ref. [16]) and for making us aware of the papers [5,11].

APPENDIX: DERIVATION OF EQ. (10)

In this Appendix, we prove Eq. (10). We consider the sums separately in the regions (a)–(d) indicated in Fig. 1 and show that they all vanish individually.

In region (a), $\pi_k R_k^{\mathrm{cut}}(\delta) \lesssim \pi_k \exp[-3\delta^2 L^\epsilon/\beta]$, and the normalization of the π_k shows that the partial sum vanishes in the limit $L \to \infty$. In (b), $\pi_k R_k^{\mathrm{cut}} \leqslant \pi_{L^{2-\epsilon}} R_{L^2}^{\mathrm{cut}} \lesssim \mathrm{const}/L^{3(2-\epsilon)/2}$ and the partial sum is smaller than const $L^{3\epsilon/2-1}$. In (c), as $1-R_k^{\mathrm{cut}}(\delta)$ decreases with k, $\pi_k[1-R_k^{\mathrm{cut}}(\delta)] \leqslant \pi_{L^2}[1-R_{L^2}^{\mathrm{cut}}(\delta)]$ and the partial sum is dominated by const $L^{\epsilon-1}$. Finally, in (d), $\pi_k[1-R_k^{\mathrm{cut}}(\delta)] \leqslant \pi_k[1-R_{L^{2+\epsilon}}^{\mathrm{cut}}(\delta)]$. The normalization condition of the π_k and the relation $L^{2+\epsilon} \gg L^2$ imply that this partial sum vanishes for $L \to \infty$. With a suitable choice of ϵ (for example $\epsilon = \frac{1}{2}$), these sums all vanish for $L \to \infty$. In fact, any function $\epsilon(L) \gg 1/\ln L$ that satisfies $\epsilon(L) < 2/3$ for $L > L_0$ can be used.

[1] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Addison-Wesley, New York, 1972).

[2] D. Ueltschi, J. Math. Phys. **47**, 123303 (2006).

[3] G. Benfatto, M. Cassandro, I. Merola, and E. Presutti, J. Math. Phys. **46**, 033303 (2005).

[4] M. Holzmann and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **83**, 2687 (1999).

[5] L. A. Shepp and S. P. Lloyd, Trans. Am. Math. Soc. **121**, 340 (1966).

[6] See Appendix E of P. T. Landsberg, *Thermodynamics, with Quantum Statistical Illustrations* (Interscience, New York, 1961).

[7] W. Krauth, *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations* (Oxford University Press, Oxford, 2006).

[8] We use the notations $A \sim B \Leftrightarrow \lim_{L\to\infty} \frac{A}{B} = 1$; $A \ll B \Leftrightarrow \lim_{L\to\infty} \frac{A}{B} = 0$; $A \gg B \Leftrightarrow \lim_{L\to\infty} \frac{A}{B} = +\infty$; $A \propto B \Leftrightarrow \lim_{L\to\infty} \frac{A}{B} = \mathrm{const} > 0$. Furthermore, $A \lesssim B \Leftrightarrow \lim_{L\to\infty} \frac{A}{B} \leqslant 1$.

[9] A. Suto, J. Phys. A **35**, 6995 (2002).

[10] R. M. Ziff, G. E. Uhlenbeck, and M. Kac, Phys. Lett., C **32**, 169 (1977).

[11] V. Goncharov, Bull. Acad. Sci. URSS **8**, 3 (1944) [Am. Math. Soc. Transl. **19** (1950)].

[12] T. C. Dorlas, P. A. Martin, and J. V. Pule, J. Stat. Phys. **121**, 433 (2005).

[13] E. L. Pollock and D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **36**, 8343 (1987).

[14] E. H. Lieb, R. Seiringer, J. P. Solovej, and J. Yngvason, *The Mathematics of the Bose Gas and its Condensation* (Birkhäuser, Basel, 2005).

[15] O. Penrose, Phys. Lett. **11**,224 (1964).

[16] A. Comtet and S. N. Majumdar (unpublished).

Deuxième publication : *Semiclassical theory of the quasi two-dimensional trapped Bose gas* M.Holzmann, M. Chevallier and W. Krauth, Europhys. Lett 82, 30001.

Cet article présente un modèle pour décrire le gaz de Bose dans un piège quasi-bidimensionnel. Le piège quasi-bidimensionnel est un piège harmonique tridimensionnel fortement anisotrope, pour lequel le confinement selon la direction verticale est très fort. À la limite thermodynamique, le piège est infiniment grand dans les directions x et y, alors que son extension verticale reste finie. Notre étude se situe pour des températures T de l'ordre de $\hbar\omega_z/k_B$. Ceci correspond à une situation où les niveaux excités selon l'axe vertical sont faiblement occupés, mais où cette occupation n'est pas négligeable.

Nous montrons dans un premier temps dans quelle mesure la prise en compte des niveaux excités selon z modifie la température de transition de Bose-Einstein du gaz sans interaction, par rapport au gaz idéal piégé strictement bidimensionnel. Nous calculons la température de transition de Bose-Einstein pour le gaz idéal en fonction du confinement des atomes selon l'axe vertical. Cette étude simple, qui ne tient pas compte des interactions, mais seulement de la géométrie du système explique déjà en partie pourquoi la température de transition vers la phase cohérente mesurée dans les expériences d'atomes froids est plus petite que pour le gaz idéal bidimensionnel.

Dans la suite, nous exposons une théorie de champ moyen, qui permet grâce à des hypothèses simplificatrices empiriques de calculer presque analytiquement les profils de densité pour le gaz de Bose en interaction dans ce piège, au-dessus de la température de transition de Kosterlitz-Thouless. Les interactions répulsives détruisent la condensation de Bose-Einstein. En revanche, des propriétés de cohérence subsistent et une transition de Kosterlitz-Thouless a lieu pour $T < T_{\mathrm{BKT}}$. Les théories de champ moyen ne permettent pas de prédire directement la température de transition. Cependant, connaissant le profil de densité, nous définissons la température de transition superfluide comme la température pour laquelle la densité au centre du piège atteint la densité critique de la transition superfluide. Cette méthode s'appuie sur l'approximation de la densité locale, et sur les calculs numériques de la densité critique de transition superfluide pour un gaz homogène bidimensionnel.

A Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics

May 2008

EPL, **82** (2008) 30001
doi: 10.1209/0295-5075/82/30001

www.epljournal.org

Semiclassical theory of the quasi–two-dimensional trapped Bose gas

Markus Holzmann[1,2], Maguelonne Chevallier[3] and Werner Krauth[3(a)]

[1] *LPTMC, Université Pierre et Marie Curie - 4 Place Jussieu, 75005 Paris, France, EU*
[2] *LPMMC, CNRS-UJF - BP 166, 38042 Grenoble, France, EU*
[3] *CNRS-Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure - 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France, EU*

received 18 January 2008; accepted in final form 9 March 2008
published online 16 April 2008

PACS 03.75.Hh – Static properties of condensates; thermodynamical, statistical, and structural properties
PACS 05.30.Jp – Boson systems

Abstract – We discuss the quasi–two-dimensional trapped Bose gas where the thermal occupation of excited states in the tightly confined direction is small but remains finite in the thermodynamic limit. We show that the semiclassical theory describes very accurately the density profile obtained by quantum Monte Carlo calculations in the normal phase above the Kosterlitz-Thouless temperature $T_{\rm KT}$, but differs strongly from the predictions of strictly two-dimensional mean-field theory, even at relatively high temperature. We discuss the relevance of our findings for analyzing ultra-cold–atom experiments in quasi–two-dimensional traps.

Copyright © EPLA, 2008

For many years, the physics of two-dimensional quantum gases has been under close experimental and theoretical scrutiny. The quest for quantum phase transitions in two-dimensional atomic Bose gases has started with experiments on spin-polarized atomic hydrogen adsorbed on liquid ^{4}He surface reaching the quantum degenerate regime (see, *e.g.*, [1,2]) and observing quasi-condensation [3]. The Kosterlitz-Thouless transition [4] was observed recently in trapped atomic gases of ultra-cold ^{87}Rb atoms in an optical lattice potential with a tightly confined z-direction [5].

In contrast to experiments with liquid ^{4}He films [6], where the Kosterlitz-Thouless transition is realized directly, the typical extension in the z-direction in the experiments on two-dimensional gases is much larger than the three-dimensional scattering length. For this reason, the effective two-dimensional interaction strength remains sensitive to the density distribution in z [7]. Nevertheless, the gas is kinematically two-dimensional because of the strong out-of-plane confinement.

In this letter, we consider the quasi–two-dimensional regime of the trapped Bose gas, where the temperature T is of the order of the level spacing in z. This corresponds to the experimental situation with small, but not completely negligible, thermal occupation of a few excited states of the tightly confining potential [5,8]. The quasi–two-dimensional regime crosses over to the three-dimensional and the strictly two-dimensional Bose gases as the potential in the z-direction is varied.

Semiclassical theory cannot describe the Kosterlitz-Thouless transition, but it is expected to describe accurately the spatial distribution of a trapped dilute gas in the normal high-temperature phase. At the transition, only the particles in the very center of the trap are critical, and it was argued that the mean-field profile should still hold down to this temperature [9]. However, it was noticed in experiments [8,10] and in direct quantum Monte Carlo calculations [11] that the density profile of the gas deviates strongly from strictly two-dimensional mean-field theory, even at relatively high temperature. Originally, these deviations were thus attributed to effects beyond mean field [8]. We point out in the present paper that they are rather accounted for by a quasi–two-dimensional mean-field theory which incorporates the thermally activated states in the tightly confined direction.

We first discuss Bose-Einstein condensation of the ideal gas in strongly anisotropic harmonic traps, and we define the quasi–two-dimensional regime where the ideal-gas critical temperature is always lower than that of the strictly two-dimensional ideal gas. By including

(a) E-mail: werner.krauth@lps.ens.fr

interactions on the level of mean field, we obtain the density profiles in the semiclassical approximation and solve the self-consistent mean-field equations directly. Remarkable agreement of the semiclassical density profiles with the results of quantum Monte Carlo calculations is obtained in the high-temperature normal phase down to the Kosterlitz-Thouless temperature. The profiles should be very convenient for calibrating the temperature in experiments of quasi–two-dimensional Bose gases. Comparison of experimental density profiles with quantum Monte Carlo data has already removed the original discrepancy of the Kosterlitz-Thouless temperature between calculation and experiment [10].

We consider an anisotropic trap with oscillator frequencies $\omega \equiv \omega_x = \omega_y \ll \omega_z$. At temperature $T \sim \hbar\omega_z$, the motion is semiclassical in the coordinates x, y and in the momenta $\hbar k_x$, $\hbar k_y$, whereas the quantization in the z-direction is best described through the energy levels $\nu\hbar\omega_z$ ($\nu = 0, 1, \ldots$) of the corresponding harmonic oscillator. Semiclassically, the number $\mathrm{d}N$ of particles per phase-space element $\mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y\mathrm{d}x\mathrm{d}y$ in the energy level ν is given by [12]

$$\mathrm{d}N = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y\mathrm{d}x\mathrm{d}y}{\exp\left[\beta(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + v(r) + \nu\hbar\omega_z - \mu)\right] - 1}, \quad (1)$$

where $\beta = 1/T$, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, and where $v(r)$ is an arbitrary two-dimensional potential energy (with $r^2 = x^2 + y^2$).

Equation (1) can be integrated over all momenta and summed over all oscillator levels to obtain the two-dimensional particle density

$$n(r) = \sum_\nu \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}k^2}{4\pi} \frac{1}{\exp\left(\beta(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + v(r) + \nu\hbar\omega_z - \mu)\right) - 1} = -\frac{1}{\lambda^2} \sum_{\nu=0}^\infty \ln\{1 - \exp\left[\beta(\mu - v(r) - \nu\hbar\omega_z)\right]\}, \quad (2)$$

where $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m}$ is the thermal wavelength. The potential $v(r)$ can itself contain the interaction with the density $n(r)$, so that eq. (2) is in general a self-consistency equation. The integral of $n(r)$ over space yields the equation of state, that is, the total number of particles as a function of temperature and chemical potential.

Let us first consider the ideal gas, where the potential energy $v(r) = m\omega^2 r^2/2$ is due only to the trapping potential, so that the rhs of eq. (2) is independent of the density $n(r)$. We get

$$N = -\frac{\pi}{\lambda^2} \sum_{\nu=0}^\infty \int_0^\infty \mathrm{d}(r^2) \ln\left[1 - \mathrm{e}^{\beta(\mu - \nu\hbar\omega_z - m\omega^2r^2/2)}\right] = \frac{T^2}{\hbar^2\omega^2} \sum_{\nu=0}^\infty F_2(-\mu\beta + \nu\beta\hbar\omega_z), \quad (3)$$

where we have defined

$$F_s(x) = \sum_{n=1}^\infty \frac{\mathrm{e}^{-nx}}{n^s}.$$

The saturation number $N_{\mathrm{sat}}(T)$ is the maximum number of excited particles (reached at $\mu = 0$) at a given temperature. We have

$$N_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{q2d}} = \frac{T^2}{\hbar^2\omega^2} \sum_{\nu=0}^\infty F_2(\nu\beta\hbar\omega_z). \quad (4)$$

The above relation between the saturation number and the temperature defines the dependence of the Bose-Einstein condensation temperature on the particle number N. As mentioned before, the strictly two-dimensional limit is characterized by the limit $\beta\hbar\omega_z \to \infty$ (the level spacing in z is much larger than the temperature). In this limit, only the first term in eq. (3) contributes. Using $F_2(0) = \pi^2/6$, we find

$$N_{\mathrm{sat}}^{\mathrm{2d}}(T) = \frac{T^2}{\hbar^2\omega^2} \frac{\pi^2}{6} \Leftrightarrow T_{\mathrm{BEC}}^{\mathrm{2d}}(N) = \frac{\sqrt{6N}\hbar\omega}{\pi}. \quad (5)$$

In the quasi–two-dimensional case, with finite $\beta\hbar\omega_z$, the occupation of the oscillator levels $\nu = 1, 2, \ldots$ increases the saturation number and therefore lowers the critical temperature. It is convenient to express in units of $T_{\mathrm{BEC}}^{\mathrm{2d}}$ both the temperature $t = T/T_{\mathrm{BEC}}^{\mathrm{2d}}$ and the oscillator strength $\tilde\omega_z = \hbar\omega_z/T_{\mathrm{BEC}}^{\mathrm{2d}}$, and to write $\tilde\mu = \beta\mu$. Using eq. (5), we may rewrite the equation of state, eq. (3), as a relation between the temperature t, the chemical potential $\tilde\mu$, and the oscillator strength $\tilde\omega_z$,

$$t = f(t, \tilde\mu, \tilde\omega_z), \quad (6)$$

with

$$f(t, \tilde\mu, \tilde\omega_z) = \left(\frac{6}{\pi^2} \sum_{\nu=0}^\infty F_2\left(-\tilde\mu + \nu\tilde\omega_z/t\right)\right)^{-1/2}. \quad (7)$$

Equation (6) is solved numerically by iterating $t_{n+1} = f(t_n)$ from an arbitrary starting temperature t_0 to the fixed point. The critical temperature $t_{\mathrm{BEC}} = T_{\mathrm{BEC}}^{\mathrm{q2d}}/T_{\mathrm{BEC}}^{\mathrm{2d}}$ (as a function of $\tilde\omega_z$) of the quasi–two-dimensional ideal Bose gas is the solution for $\tilde\mu = 0$ (see fig. 1). The reduction with respect to the strictly two-dimensional case is notable for systems of experimental interest. For example, we find $t_{\mathrm{BEC}} = 0.78$ for the experimental value $\tilde\omega_z = 0.55$ [5,8] considered in the quantum Monte Carlo calculations [11].

We can expand eq. (7) for small and for large $\tilde\omega_z$ and find

$$t_{\mathrm{BEC}} \sim \begin{cases} \left[\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)}\right]^{1/3} \tilde\omega_z^{1/3} - \frac{1}{6}\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)}\tilde\omega_z, & \text{for } \tilde\omega_z \ll 1, \\ 1 - \frac{1}{2\zeta(2)^{3/2}} \exp\left(-\tilde\omega_z\right), & \text{for } \tilde\omega_z \gg 1, \end{cases} \quad (8)$$

where we have used $\zeta(s) \equiv F_s(0)$ (note that $\zeta(2) = \pi^2/6$ and $\zeta(3) \simeq 1.202$). The expansions are indicated in fig. 1. They give the critical temperature to better than 1.2% for all values of $\tilde\omega_z$ (the low-$\tilde\omega_z$ expansion is used for $\tilde\omega < 1.8$ and the high-$\tilde\omega_z$ expansion for $\tilde\omega > 1.8$). The first term in the small-$\tilde\omega_z$ expansion of eq. (8) corresponds to the three-dimensional gas. Indeed, $t_{\mathrm{BEC}} \sim [\zeta(2)/\zeta(3)]^{1/3}\tilde\omega_z^{1/3}$

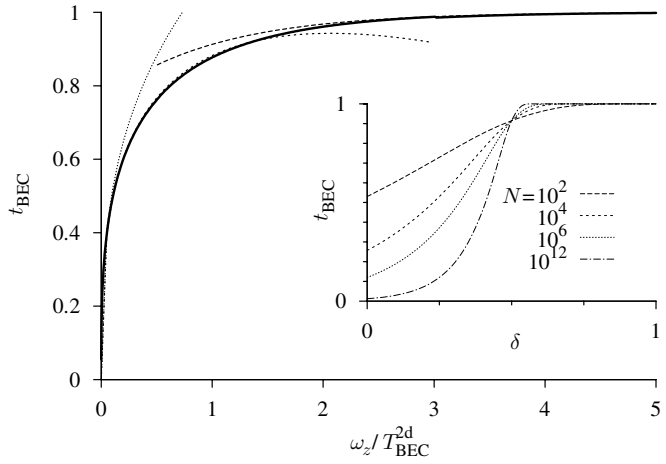


Fig. 1: Bose-Einstein condensation temperature $t_{\rm BEC}$ of the ideal quasi–two-dimensional gas in a harmonic trap with $\omega_z/\omega \propto N^{1/2}$ (expansions from eq. (8)). The inset shows $t_{\rm BEC}$ for scaling $\omega_z/\omega = N^\delta$ as a function of δ for different N. At $\delta = 0$, the critical temperature $T_{\rm BEC}^{\rm 3d} = [N/\zeta(3)]^{1/3}$ of the ideal gas in a three-dimensional isotropic trap is recovered.

is equivalent to

$$T_{\rm BEC} \sim \left[\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)}\right]^{1/3} (\hbar\omega_z)^{1/3} (T_{\rm BEC}^{\rm 2d})^{2/3} \sim \left[\hbar^3\omega_z\omega^2/\zeta(3)\right]^{1/3} N^{1/3}, \tag{9}$$

the well-known condensation temperature for the three-dimensional Bose-Einstein gas in an anisotropic trap [13]. Equation (9) also follows directly from eq. (4) by replacing the sum over the oscillator levels by an integral. Likewise, the first term in the large-$\tilde\omega_z$ expansion of eq. (8) represents the strictly two-dimensional gas.

The inset of fig. 1 further analyzes the expansions of eq. (8). Indeed, we can choose a scaling $\omega_z/\omega \sim N^\delta$ different from the quasi–two-dimensional case $\delta = 1/2$. Any choice of $\delta < 1/2$ corresponds to $\tilde\omega_z \to 0$ for $N \to \infty$ so that asymptotically the three-dimensional regime is reached. Analogously, $\delta > 1/2$ corresponds to $\tilde\omega_z \to \infty$ for $N \to \infty$, driving the transition into the strictly two-dimensional regime. The rescaled transition temperatures are plotted for $\omega_z/\omega = N^\delta$ where the case $\delta = 0$ corresponds to the three-dimensional isotropic trap[1].

In order to describe interaction effects in the quasi–two-dimensional Bose gas, we now add a semiclassical contact term to the potential energy of eq. (2):

$$v(r) = m\omega^2 r^2/2 + 2g[n(r) - n(0)]. \tag{10}$$

We have subtracted the central density, so that the potential still vanishes at the origin. As discussed earlier [11], the effective interaction $g = 4\pi a\hbar^2/m \int {\rm d}z\,[\rho(z)]^2$ is proportional to the three-dimensional s-wave scattering length a and to the integral of the squared density distribution in z, described by the normalized diagonal density matrix $\rho(z)$. In the temperature range of interest, this density distribution is well described by the single-particle harmonic-oscillator density matrix in z, leading to

$$g = a\sqrt{\frac{8\pi\omega_z\hbar^3}{m}}\sqrt{\tanh[\tilde\omega_z/(2t)]}. \tag{11}$$

The effective interaction thus decreases with temperature from its zero-temperature value $\tilde g = a\sqrt{8\pi\omega_z\hbar^3/m}$. To keep the interaction strength fixed, we must keep g (or equivalently $\tilde g$) constant in the quasi–two-dimensional thermodynamic limit which requires a fixed value of the scaled scattering length $a\sqrt{\omega_z} \propto a\omega^{1/2}N^{1/4}$.

The mean-field density $n(r)$, on the lhs of eq. (2), depends on the variable r only via the potential $v(r)$. In the space integral over the particle density, we can thus change the integration variable from r to v. This allows us to determine the equation of state explicitly:

$$\begin{aligned} N \;&=\; \pi\int_0^\infty {\rm d}(r^2)\; n(r) = \pi\int_0^\infty {\rm d}v\;\left[\frac{\partial(r^2)}{\partial v}\right] n(v) = \\ &\frac{2\pi}{m\omega^2}\int_0^\infty {\rm d}v\;\left[1 - 2g\frac{\partial n}{\partial v}\right] n(v) = \\ &\frac{T^2}{\hbar^2\omega^2}\left(\sum_{\nu=0}^\infty F_2(-\tilde\mu + \nu\beta\hbar\omega_z) + \frac{mg}{2\pi\hbar^2}\left[n(0)\lambda^2\right]^2\right), \end{aligned} \tag{12}$$

where the central density,

$$n(0)\lambda^2 = -\sum_{\nu=0}^\infty \ln\{1 - \exp(\tilde\mu - \nu\tilde\omega_z/t)\}, \tag{13}$$

is directly expressed in terms of $\tilde\mu$, independently of the interaction, due to the subtraction performed in our effective potential, eq. (10). (Note that the first integral on the second line of eq. (12) has already appeared in eq. (3) and that the second integral is a total derivative.) The equation of state can be written in terms of the temperature t. This yields the following generalization of eq. (7) to the mean-field gas:

$$t = \left(\frac{6}{\pi^2}\left[\sum_{\nu=0}^\infty F_2\left(-\tilde\mu + \nu\frac{\tilde\omega_z}{t}\right) + \frac{mg}{2\pi\hbar^2}[n(0)\lambda^2]^2\right]\right)^{-1/2}. \tag{14}$$

An iteration procedure $t_{n+1} = f(t_n)$ again obtains the temperature $t = T/T_{\rm BEC}^{\rm 2d}$ as a function of the chemical potential $\tilde\mu$ for given parameters $\tilde\omega_z$ and g. (The central density is computed using eq. (13) during each iteration.)

The mean-field density profile is obtained in two steps by first calculating the density profile as a function of the scaled effective potential $\tilde v = \beta v$,

$$n(\tilde v)\lambda^2 = -\sum_{\nu=0}^\infty \ln\{1 - \exp(\tilde\mu - \tilde v - \nu\tilde\omega_z/t)\},$$

[1] The inset of fig. 1 is evaluated from the asymptotic expansion eq. (8). Very similar results for T_c follow from the exact saturation numbers at finite N.

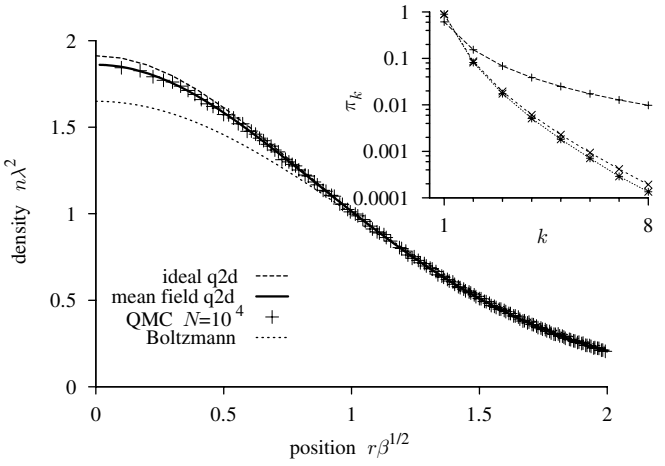


Fig. 2: Two-dimensional density profile $n(r=\sqrt{x^2+y^2})\lambda^2$ at temperature $T=T_{\rm BEC}^{\rm 2d}$ in a trap with $\omega_z=0.55T_{\rm BEC}^{\rm 2d}$, in the ideal Bose gas and for $m\tilde{g}/\hbar^2=0.13$ according to mean-field theory, compared to quantum Monte Carlo simulations at $N=10000$, and for ideal distinguishable particles (first term in eq. (16)). The inset shows the cycle weights π_k for the strictly two-dimensional and the quasi–two-dimensional ideal Bose gas, and for the quantum Monte Carlo simulations (from above).

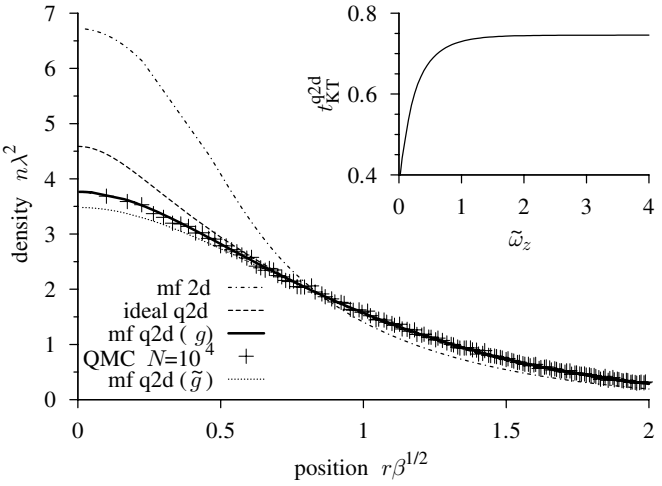


Fig. 3: Two-dimensional density profile $n(r=\sqrt{x^2+y^2})\lambda^2$ at temperature $T=0.8\,T_{\rm BEC}^{\rm 2d}$ in a trap with $\omega_z=0.55T_{\rm BEC}^{\rm 2d}$, in the ideal Bose gas and for $m\tilde{g}/\hbar^2=0.13$ according to strictly two-dimensional and quasi–two-dimensional mean-field theory (using g and $\tilde{g}$), compared to quantum Monte Carlo simulations with $N=10000$. The inset shows the Kosterlitz-Thouless temperature within modified mean-field theory as a function of $\tilde{\omega}_z$ (the strictly two-dimensional limit is $t_{\rm KT}^{\rm 2d}=0.745$ (from eq. (18)).

and then by inverting eq. (10) to obtain $r(n)$ (thus $n(r)$) for the given $\tilde{v}$ and $n\lambda^2$:

$$r(n\lambda^2,\tilde{v})=\sqrt{\frac{2T}{m\omega^2}\left(\tilde{v}-\frac{mgn\lambda^2}{\pi\hbar^2}\right)}. \qquad (15)$$

In fig. 2, we show the remarkable agreement of the quasi–two-dimensional mean-field profile with the one obtained by quantum Monte Carlo simulations as in ref. [11], for $N=10000$ bosons for parameters $\tilde{\omega}_z=0.55$, $t=T/T_{\rm BEC}^{\rm 2d}=1$, and $m\tilde{g}/\hbar^2=0.13$. The simulations take into account the full three-dimensional geometry, and particles interact via the three-dimensional s-wave scattering length a (see ref. [14] for a more detailed description of finite-temperature simulations of trapped Bose gases). Comparison with the ideal quasi–two-dimensional gas is also very favorable.

The mean-field density is extremely well represented by a sum of Gaussians,

$$n(r)\lambda^2=\frac{\pi^2}{6t^2}\sum_{k=1}^{N}k\pi_k\exp\left[-\frac{m\omega^2(r\sqrt{k\beta})^2}{2}\right], \qquad (16)$$

whose variances correspond to the density distribution of the harmonic oscillator at temperature $k\beta$. The prefactors in eq. (16) contain the cycle weights π_k. These weights give the probability of a particle to be in a cycle of length k in the path-integral representation of the Bose gas, where the density matrix must be symmetrized through a sum of permutations [15,16]. For the ideal Bose gas, the π_k are easily computed for any choice of the three-dimensional oscillator frequencies. Mean-field theory modifies these weights, without essentially changing the functional form of eq. (16). In the distinguishable-particle limit, at infinite temperature, only cycles of length $k=1$ contribute ($\pi_1=1$), whereas the Bose-Einstein condensate is characterized through contributions of cycles of length $k\propto N$. The cycle weights π_k are shown in the inset of fig. 2 for small k. Only very short cycles contribute, and the density profile can thus be described by a very small number of Gaussians. The exact cycle-weight distribution of the quantum Monte Carlo calculation does not rigorously correspond to a profile as in eq. (16), although the corrections are negligible in our case.

Figure 3 considers the temperature $t=0.8$ in the interval between the Kosterlitz-Thouless temperature of the quasi–two-dimensional interacting gas (at $t=t_{\rm KT}\simeq 0.70$ for these parameters [11]) and the strictly two-dimensional Bose-Einstein condensation temperature. Again, the agreement of the quasi–two-dimensional mean field with the exact density profile obtained by quantum Monte Carlo calculation is remarkable. At this temperature, the deviations with the ideal quasi–two-dimensional profile and with the strictly two-dimensional mean field are important. To illustrate the temperature dependence of the effective interaction, we also show the mean-field profile computed with the zero-temperature interaction parameter $\tilde{g}$ instead of the true effective two-dimensional interaction g (see eq. (11)). We note in this context that the difference in eq. (11) between g and $\tilde{g}$ was determined under the condition that the interaction leaves the density distribution in z unchanged. Whenever this condition is violated, the density distribution in z must be computed by other means, as for example by quantum Monte Carlo methods (see [11]). The importance of changes of the

density profile in z in the low-temperature regime of a quasi-condensed Bose gas has already been pointed out in the context of spin-polarized hydrogen absorbed on helium surfaces [17].

Let us finally discuss the Kosterlitz-Thouless transition into the low-temperature phase, which is not contained in mean-field theory. The semiclassical quasi–two-dimensional gas does not Bose-condense because the particle number in eq. (12) diverges at $\tilde{\mu} = 0$ (it saturates at a finite value in the ideal Bose gas). This divergence is due to the logarithmic divergence of the central density (see eq. (13)). However, interaction effects beyond mean-field drive a Kosterlitz-Thouless phase transition [4] from the high-temperature normal phase to a superfluid one below $T_{\rm KT}$.

As discussed previously [9,11], the Kosterlitz-Thouless transition occurs when the central density $n(0)\lambda^2$ reaches the critical value of the two-dimensional homogeneous gas, which has been determined numerically [18] for $g \to 0$:

$$n(0)\lambda^2 \simeq n_c\lambda^2 \simeq \log\frac{380\hbar^2}{mg}. \qquad (17)$$

We can introduce (by hand) the concept of a critical density into mean-field theory by selecting among the solutions $t(\tilde{\mu})$ of eq. (14) the one satisfying eq. (17). For the interaction parameters used in ref. [11], $m\tilde{g}/\hbar^2 = 0.13$, we find a mean-field critical temperature $t_{\rm KT}^{\rm q2d} = T_{\rm KT}^{\rm q2d}/T_{\rm BEC}^{\rm 2d} = 0.69$. This value is in excellent agreement with the Monte Carlo data. The inset of fig. 3 shows the variation of this mean-field critical temperature as a function of $\tilde{\omega}_z$ (for $m\tilde{g}/\hbar^2 = 0.13$).

The calculation of the mean-field critical temperature simplifies further in the strictly two-dimensional Bose gas, because the chemical potential in eq. (13) is then an explicit function of the critical density, and can be entered into eq. (12). With $\tilde{\mu}_c = \ln\left\{1 - \exp\left(-n_c\lambda^2\right)\right\} \simeq -mg/(380\hbar^2)$, and by again transforming the equation for N *vs.* central density into a relation between critical temperatures [9,11], we obtain

$$t_{\rm KT}^{\rm 2d} = \frac{T_{\rm KT}^{\rm 2d}}{T_{\rm BEC}^{\rm 2d}} = \left[1 + \frac{3mg}{\pi^3\hbar^2}\left(\ln\frac{380\hbar^2}{mg}\right)^2\right]^{-1/2}, \qquad (18)$$

where we have neglected small corrections of order $\tilde{\mu}_c \log|\tilde{\mu}_c|$. The strictly two-dimensional limit $t_{\rm KT}^{\rm 2d} = 0.745$ for $mg/\hbar^2 = 0.13$ agrees with the data shown in the inset of fig. 3 in the large $\tilde{\omega}_z$ limit.

In conclusion, we have considered in this letter the semiclassical description of the quasi–two-dimensional trapped Bose gas. We have compared this description with quantum Monte Carlo data and have shown that the density profiles are accurately reproduced in the normal phase down to the Kosterlitz-Thouless temperature. The thermal occupation of excited states in the out-of-plane direction quantitatively explains the large deviations of the density profiles from strictly two-dimensional mean-field theory, which was recently noticed in the experiment [8]. Originally, it was speculated that the emerging almost-Gaussian density profiles could be attributed to effects beyond mean field [8,10]. However, even though the thermal occupation of the excited states in the tightly confined direction is clearly noticeable for the experimental parameters, the transition itself is still of the Kosterlitz-Thouless type as revealed by the experimental coherence patterns [5] and confirmed by numerical calculations of the algebraic decay of the condensate density with system size [11].

* * *

We are indebted to J. Dalibard for many inspiring discussions.

REFERENCES

[1] Safonov A. I., Vasilyev S. A., Yasnikov I. S., Lukashevich I. I. and Jaakkola S., *JETP Lett.*, **61** (1995) 1032.

[2] Mosk A. P., Reynolds M. W., Hijmans T. W. and Walraven J. T. M., *Phys. Rev. Lett.*, **81** (1998) 4440.

[3] Safonov A. I., Vasilyev S. A., Yasnikov I. S., Lukashevich I. I. and Jaakkola S., *Phys. Rev. Lett.*, **81** (1998) 4545.

[4] Kosterlitz J. M. and Thouless D. J., *J. Phys. C*, **6** (1973) 1181; Kosterlitz J. M., *J. Phys. C*, **7** (1974) 1046; Berezinskii V. L., *Sov. Phys. JETP*, **32** (1971) 493; **34** (1972) 610.

[5] Hadzibabic Z., Krüger P., Cheneau M., Battelier B. and Dalibard J., *Nature*, **441** (2006) 1118.

[6] Bishop D. J. and Reppy J. D., *Phys. Rev. Lett.*, **40** (1978) 1727; *Phys. Rev. B*, **22** (1980) 5171; Agnolet G., McQueeney D. F. and Reppy J. D., *Phys. Rev. B*, **39** (1989) 8934.

[7] Petrov D. S., Holzmann M. and Shlyapnikov G. V., *Phys. Rev. Lett.*, **84** (2000) 2551.

[8] Krüger P., Hadzibabic Z. and Dalibard J., *Phys. Rev. Lett.*, **99** (2007) 040402.

[9] Holzmann M., Baym G., Blaizot J.-P. and Laloë F., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **104** (2007) 1476.

[10] Hadzibabic Z., Krüger P., Cheneau M., Rath S. P. and Dalibard J., preprint arXiv:0712.1265 (2007).

[11] Holzmann M. and Krauth W., preprint arXiv:0710.5060 (2007), to be published in *Phys. Rev. Lett.* (2008).

[12] Landau L. D. and Lifshitz E. M., *Statistical Physics, Course of Theoretical Physics*, Vol. **5** (Butterworth-Heinemann, Oxford) 1980, Chapt. 56, p. 162.

[13] Bagnato V. and Kleppner D., *Phys. Rev. A*, **44** (1991) 7439.

[14] Krauth W., *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3695; Holzmann M. and Castin Y., *Eur. Phys. J. D*, **7** (1999) 425.

[15] Krauth W., *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations* (Oxford University Press, Oxford, UK) 2006.

[16] Chevallier M. and Krauth W., *Phys. Rev. E*, **76** (2007) 051109.

[17] Kagan Yu., Glukhov N. A., Svistunov B. V. and Shlyapnikov G. V., *Phys. Lett. A*, **135** (1989) 219.

[18] Prokof'ev N., Ruebenacker O. and Svistunov B., *Phys. Rev. Lett.*, **87** (2001) 270402.

Résumé

Cette thèse porte sur le gaz de Bose à basse température. La première partie présente le lien mathématique entre la condensation de Bose-Einstein et le groupe des permutations. L'expression de la fonction de partition bosonique en intégrale de chemin fait apparaître la factorisation en produit de cycles des permutations. Pour un gaz de Bose idéal, l'existence d'un condensat de Bose-Einstein est équivalente à l'apparition de cycles de longueur infinie. La discussion s'étend ensuite aux gaz en interaction, et à l'étude de la superfluidité.

La deuxième partie se concentre sur les gaz atomiques ultra-froids quasi-bidimensionnels, qui sont l'objet d'expériences récentes. L'approche du gaz de Bose en intégrale de chemin a permis de clarifier le rôle de l'excitation thermique résiduelle du mouvement vertical. Un modèle de champ moyen tenant compte de la troisième dimension est en accord avec les résultats numériques et expérimentaux, au-dessus de la température critique. Les déviations par rapport à la théorie de champ moyen sont étudiées au voisinage de la transition superfluide, où le gaz entre dans un régime dégénéré avec de forts effets de corrélations de paires.

Abstract

This thesis deals with the Bose gas at low temperature. The first part presents the mathematical relationship between Bose-Einstein condensation and the group of permutations in the path-integral representation of the bosonic partition function. For an ideal Bose gas, Bose-Einstein condensation is found to be equivalent to a non-zero probability of finding infinite permutation cycles. The discussion is extended to the interacting Bose gas, and to the study of superfluidity.

The second part concentrates on the quasi-two-dimensional ultra-cold atomic Bose gas which has been the object of recent experiments. Its description in terms of permutation cycles has allowed us to clarify the role of residual thermal excitations in the tightly confined perpendicular direction. A mean-field model which accounts for the occupation of the excited states in the third dimension agrees with the density profiles obtained experimentally and numerically, above the critical temperature. The deviations from mean-field theory are studied in the vicinity of the Kosterlitz-Thouless transition, where the gas enters a degenerate regime with strong pair-correlation effects.

Mots Clés

Condensation de Bose-Einstein, intégrale de chemin, transition de Kosterlitz Thouless, gaz de Bose piégé quasi-bidimensionnel, distribution des longueurs de cycles, théorie de champ moyen.

Bose-Einstein condensation, path-integral, superfluidity, quasi-two-dimensional trapped Bose gas, cycle probabilities, mean-field theory.