# Condensation et superfluidité dans un gaz de bosons à une dimension

Examen du cours “Fluides quantiques" M1 ICFP 2013-2014

A. Sinatra and K. Van Houcke

*Durée 3 heures*

Dans tout le problème, nous considérons un gaz à une dimension, composé de $N$ bosons de masse $m$ non relativistes et sans spin. Le gaz est confiné dans la boîte $[0, L]$ avec des conditions aux limites périodiques.
Dans le cas avec interaction, le hamiltonien du système est

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq N} V(\hat{x}_i - \hat{x}_j) \tag{1}$$

où $\hat{p}_i$ est l'opérateur impulsion de la particule $i$, $\hat{x}_i$ est l'opérateur position et $V(\hat{x}_i - \hat{x}_j)$ le potentiel d'interaction. Dans tout le problème, le système est à l'équilibre thermique.

## 1 Influence de la dimensionalité sur la condensation de Bose-Einstein

Nous allons montrer que la dimension de l'espace joue un rôle important dans le phénomène de condensation de Bose-Einstein, si bien qu'à une dimension il n'y a pas de condensation à la limite thermodynamique.
Dans toute cette section, nous considérons un gaz parfait, $V(\hat{x}_i - \hat{x}_j) = 0$, si bien que

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \tag{2}$$

Le système est à l'équilibre thermique dans l'ensemble grand canonique avec un potentiel chimique $\mu$ et une température $T$.

### 1.1 Saturation de la population des états excités

1. Les états propres du hamiltonien à une particule sont les ondes planes de vecteur d'onde $k$ :

$$\phi_k(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} \tag{3}$$

   Quelles valeurs peut prendre $k$ compte tenu des conditions aux limites périodiques ? Que vaut l'énergie propre à une particule $\epsilon_k$ en fonction de $k$ ?
2. Écrire la fonction d'onde $\phi_0(x)$ de l'état fondamental à une particule, et donner son énergie.
3. Notons $N'$ la population des états excités. Exprimer $N'$ comme une somme des nombres d'occupation moyens $N_k$ des état $\phi_k$. On rappelle que $N_k = [e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1]^{-1}$.
4. Expliquer pourquoi $N'$ est majoré par la valeur

$$N'_{\max} = \sum_{k \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \epsilon_0)} - 1} \tag{4}$$

5. Das la limite d'un grand système, la densité d'états $\rho(\epsilon)$ permet de passer de la somme sur les états à une intégrale sur $\epsilon$ :

$$\sum_k f(\epsilon_k) \;\to\; \int d\epsilon\, \rho(\epsilon)\, f(\epsilon) \tag{5}$$

Montrer que, pour notre système à une dimension

$$\rho(\epsilon) = \frac{L}{\pi}\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}}\frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \tag{6}$$

6. Montrer que l'intégrale ainsi obtenue pour $N'_{\max}$ diverge. S'agit-il d'une divergence infrarouge ou ultraviolette ?
7. Dans $N'_{\max}$ il faut donc revenir à une somme. Pour calculer la contribution divergente, nous allons utiliser l'approximation
$$N_k \simeq \frac{k_B T}{\epsilon_k - \mu} \tag{7}$$
(dite de champ classique) valable pour $N_k \gg 1$. Montrer qu'on obtient alors
$$N'_{\max} = \frac{L^2}{\lambda_{dB}^2}\frac{\pi}{3} \tag{8}$$
où $\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}}$ est la longueur d'onde thermique de Broglie et on a utilisé l'identité $\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$.
8. On appelle $\rho = N/L$ la densité spatiale et $\rho'$ la densité spatiale totale des bosons dans les états excités. Exprimez $\rho'_{\max}\lambda_{dB}$ en fonction de $L$ et expliquez pourquoi il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein à la limite thermodynamique, définie par $L \to \infty$, $N \to \infty$, $\rho =$ constante, $T =$ constante.
9. Donner les nombres d'occupation moyens, $N_0$ et $N_1$, de l'état d'énergie minimale $\phi_0$ et du premier état excité $\phi_1$ dans l'approximation de champ classique, en fonction de $k_BT$, $|\mu|$ et $\epsilon_1$.
10. Montrer que $N_0 \gg N_1 \Leftrightarrow |\mu| \ll \epsilon_1 \Leftrightarrow \rho\lambda_{dB} \gg \rho'_{\max}\lambda_{dB}$. On peut donc avoir "condensation" de Bose-Einstein dans un système de taille finie.

### 1.2 Fonction de corrélation spatiale

On rappelle l'expression de la fonction de corrélation :

$$g^{(1)}(x,x') = \langle \mathcal{A} \rangle \quad \text{avec} \quad \mathcal{A} = \sum_{i=1}^{N} |i:x\rangle\langle i:x'| = \sum_{i=1}^{N} A(i)$$

qui donne la cohérence entre $x$ et $x'$. Nous avons vu qu'à l'équilibre dans l'ensemble grand canonique, on a :

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \sum_k N_k \langle k|A|k\rangle = \sum_k N_k \phi_k^*(x)\phi_k(x')$$

avec $|k\rangle$ état propre du hamiltonien à une particule, $\hat{h}_1|k\rangle = \epsilon_k|k\rangle$.

11. Exprimer $g^{(1)}(x,x')$ comme une somme sur $k$, en fonction de $\epsilon_k$, $\mu$, $x$ et $x'$ et $k_BT$ .
12. Pour $L \gg \lambda_{dB}$ et dans l'approximation de champ classique, on donne le résultat suivant :
$$g^{(1)}(x,x') = \rho e^{-|x-x'|/l_C} \quad \text{avec} \quad l_C = \frac{\rho\lambda_{dB}^2}{2\pi} \tag{9}$$
ce que l'on ne cherchera pas à montrer. En déduire que la longueur de corrélation spatiale est infiniment petite par rapport à la taille du système à la limite thermodynamique.
13. Montrer que, pour un système dégénéré $\rho\lambda_{dB} \gg 1$, on a une longueur de corrélation $l_C \gg \lambda_{dB}$. Comment se compare alors $l_C$ à la longueur de cohérence d'un gaz non dégénéré ?
14. Montrer que, pour un système de taille finie, si $\rho\lambda_{dB} \gg \rho'_{\max}\lambda_{dB}$ alors $l_C \gg L$.

## 2 Le gaz parfait : superfluidité et condensation

Dans cette partie, le hamiltonien reste celui (2) du gaz parfait, et nous considérons la réponse du système à une tentative de mise en mouvement. Le but est de mettre en évidence la différence entre la fraction superfluide et la fraction condensée. Nous nous limitons au régime dégénéré $\rho\lambda_{dB} \gg 1 \Leftrightarrow e^{\beta\mu} \to 1^-$. Pour pouvoir procéder analytiquement, on effectue sur les nombres d'occupation l'approximation "de champ classique", valable dans la limite $N_k \gg 1$ :

$$N_k \simeq \frac{k_BT}{\epsilon_k - \mu}\,. \tag{10}$$

Par contre, on ne remplacera pas les sommes par des intégrales.

### 2.1 Calcul de la fraction normale $f_n$

On rajoute au hamiltonien (2) un potentiel de touillage qui brise l'invariance par translation et qui avance à la vitesse $v_{\rm rot}$ :

$$\hat{W}(t) = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{W}(\hat{x}_i - v_{\rm rot}t). \tag{11}$$

Dans un système de taille finie, c'est-à-dire avant de prendre la limite thermodynamique, on définit la fraction normale $f_n$ comme suit :

$$f_n = \lim_{v_{\rm rot}\to 0} \lim_{\mathcal{W}\to 0} \frac{\langle \hat{P} \rangle}{Nmv_{\rm rot}} \tag{12}$$

où l'on a introduit l'opérateur impulsion totale du gaz :

$$\hat{P} = \sum_{i=1}^{N} \hat{p}_i. \tag{13}$$

dont la moyenne $\langle \hat{P} \rangle$ est prise dans l'état thermalisé en présence de la perturbation.
Pour éliminer la dépendance en temps du potentiel de touillage, il convient d'introduire un changement de repère. On introduit la transformation unitaire dépendant du temps

$$\hat{U}(t) = e^{i\hat{P}v_{\rm rot}t/\hbar} \tag{14}$$

À l'issue de cette transformation unitaire, le vecteur d'état du système $|\tilde{\psi}(t)\rangle \equiv \hat{U}(t)|\psi(t)\rangle$ évolue avec un hamiltonien

$$\tilde{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t=0) - \hat{P}v_{\rm rot} \tag{15}$$

où $\hat{H}_0$ est définie par (2) et $\hat{W}(t)$ est définie par (11).
L'état d'equilibre thermodynamique du gaz dans l'ensemble grand canonique, en présence de la perturbation, est donc décrit par l'opérateur densité

$$\hat{\sigma} = \frac{1}{Z_{GC}} e^{-\beta(\tilde{H}-\mu\hat{N})} \quad \text{avec } \tilde{H} \text{ donné par (15) et} \quad Z_{GC} = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(\tilde{H}-\mu\hat{N})} \tag{16}$$

Dans toute la suite, pour le calcul de $f_n$, on pourra prendre la limite $\mathcal{W} \to 0$ directement dans $\hat{\sigma}$ donc dans $\tilde{H}$.

15. Écrire les fonctions d'ondes $\langle x|k\rangle$ des états propres à une particule du Hamiltonien $\tilde{H}$.
16. Écrire les énergies propres $\epsilon_k$ correspondantes.
17. Quelles sont les valeurs admissibles pour le vecteur d'onde $k$ compte tenu des conditions aux limites périodiques ?
18. Exprimer la valeur moyenne $\langle \hat{P} \rangle$ en fonction des nombres d'occupation moyens $N_k$ des états propres à une particule.
19. Dans l'approximation de champ classique (10) exprimer le nombre moyen de particules $\langle \hat{N} \rangle \equiv N$ comme une somme sur les états. Montrer que

$$N = \frac{mL^2k_BT}{2\pi^2\hbar^2} \sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{1}{(n-\tilde{v})^2 + \nu_0^2}, \tag{17}$$

avec $\tilde{v} = v_{\rm rot}/v_1$ et $\nu_0^2 = -\mu/E_1 - \tilde{v}^2$ où $v_1$ et $E_1$ sont respectivement la vitesse et l'énergie d'une particule dans le premier état excité de la boîte pour le hamiltonien $\hat{H}_0$.

20. En utilisant la formule sommatoire de Poisson :

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} f(n) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \hat{f}(2\pi n), \tag{18}$$

où $f(x)$ est une fonction quelconque et $\hat{f}(q)$ sa transformée de Fourier, montrer qu'on arrive à l'expression :

$$N = \frac{mL^2k_BT}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi\nu_0} \frac{\sinh(2\pi\nu_0)}{\cosh(2\pi\nu_0) - \cos(2\pi\tilde{v})} \tag{19}$$

On rappelle que pour

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \frac{a}{a^2 + x^2} \tag{20}$$

avec $a > 0$, on a

$$\hat{f}(q) = e^{-a|q|}\,. \tag{21}$$

21. Par des moyen similaires, on obtient le résultat suivant que l'on ne cherchera pas à établir :

$$\langle \hat{P} \rangle = Nm\, v_{\text{rot}} - \frac{mLk_BT}{\hbar} \frac{\sin(2\pi\tilde{v})}{\cosh(2\pi\nu_0) - \cos(2\pi\tilde{v})}. \tag{22}$$

Montrer que la fraction normale $f_n$ définie par (12) est alors donnée par

$$f_n = 1 - \frac{\nu_0}{\sinh(2\pi\nu_0)}. \tag{23}$$

### 2.2 Comparaison avec la fraction non condensée $f_{\text{nc}}$

22. Utiliser la valeur de $N$ donnée par (19) pour calculer la fraction non condensée dans la limite $v_{\text{rot}} = 0$ :

$$f_{\text{nc}} = \frac{N - N_0}{N} \tag{24}$$

23. À la lumière des résultats de la première partie du sujet, dire à quoi correspond physiquement la limite $\nu_0 \ll 1$.
24. Montrer que, dans cette limite, au second ordre inclus en $\nu_0$, l'on trouve une relation très simple entre $f_n$ et $f_{\text{nc}}$ qui indique que le condensat du gaz parfait n'est pas complètement superfluide à 1D.

## 3 Le gaz en interaction

On considère un potentiel d'interaction $V$ de portée nulle

$$V(x_i - x_j) = g\delta(x_i - x_j) \tag{25}$$

où $\delta$ est la distribution de Dirac et $g > 0$ est la constante de couplage.
Nous allons calculer la fraction normale du gaz en interaction dans un régime dans lequel on peut utiliser l'approche de Bogoliubov. Nous admettrons que l'approche de Bogoliubov reste valable en l'absence d'un vrai condensat pourvu que le système soit (i) dans le régime d'interaction faible défini par

$$\rho\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2\rho}{mg}} \gg 1 \quad \text{où } \xi \text{ est la “longueur de réparation"} \tag{26}$$

et (ii) à une température suffisamment basse pour que les fluctuation de densité soient faibles :

$$k_BT \ll k_BT_{\text{fd}} = \rho g \times \rho\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2\rho^3 g}{m}} \tag{27}$$

25. Montrer que, dans le régime d'interaction faible (26), on a toujours $k_BT_{\text{fd}} \ll k_BT_{\text{deg}}$ où $k_BT_{\text{deg}}$ est la température de dégénérescence correspondant à $\rho\lambda_{\text{dB}} = 1$. Le fait qu'on ait ou pas un vrai condensat, dépend par contre de la taille du système (voir la première partie du sujet).

Nous allons montrer que le cas 1D est très particulier car à l'équilibre le poids statistique correspondant au fait que le condensat soit en mouvement spontanément (c'est-à-dire même en l'absence du potentiel de touillage) n'est pas négligeable.
Pour le calcul de fraction normale, nous allons utiliser le résultat établi en Travaux Dirigés :

$$f_n = \frac{\langle \hat{P}^2 \rangle_0}{NmkT} \tag{28}$$

où l'indice 0 indique ici que la moyenne est prise dans l'état thermique en l'absence du potentiel de touillage. Toute la suite sera consacrée au calcul de cette moyenne (28), d'abord pour un condensat en mouvement (la fonction d'onde du condensat est une onde plane de vecteur d'onde $k_0$), ensuite pour une moyenne thermique sur les valeurs de $k_0$ possibles.

### 3.1 Calcul de la valeur moyenne de $\hat{P}^2$ pour un condensat en mouvement

Dans cette partie, nous utilisons l'approche de Bogoliubov pour un condensat en mouvement avec un vecteur d'onde $k_0$ :

$$k_0 = \frac{2\pi n}{L} = \text{ vecteur d'onde du condensat en mouvement} \tag{29}$$

En introduisant les modes de quasi-particule appropriés, le hamiltonien prend la forme [1]

$$\hat{H}_{\text{Bog}} = E[\phi] + \sum_{k\neq 0} \epsilon_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \tag{30}$$

où $\hat{b}_k$ et $\hat{b}_k^\dagger$ sont les opérateurs bosoniques de quasi-particule tels que $[\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger] = 1$, $\hat{n}_k \equiv \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$ est l'opérateur nombre de quasi-particules, et $E[\phi]$ est la fonctionnelle énergie de Gross-Pitaevskii :

$$E[\phi] = N \int dx \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\phi}{dx} \right|^2 + \frac{g}{2} N |\phi|^4 \right]. \tag{31}$$

Les énergies de quasi-particule $\epsilon_k$ diffèrent des énergies $\epsilon_k^{(0)}$, obtenues dans le cas où le condensat est au repos. En particulier on a

$$\epsilon_k = \epsilon_k^{(0)} + \hbar k v_0 \quad \text{avec} \quad v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} \tag{32}$$

À l'équilibre thermique, le système est décrit par l'opérateur densité

$$\hat{\sigma}_{\text{Bog}}^{k_0} = \frac{e^{-\beta \hat{H}_{\text{Bog}}}}{Z_{k_0}} \tag{33}$$

26. Calculer la fonction de partition $Z_{k_0} = \text{Tr}\left[e^{-\beta \hat{H}_{\text{Bog}}}\right]$ en fonction de $\beta$, $\epsilon_k$ et $E[\phi]$.
27. Montrer que
$$\langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \rangle \equiv n_k = f(\epsilon_k) \quad \text{avec} \quad f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_k} - 1}. \tag{34}$$
On pourra considérer la dérivée de la fonction de partition $Z_{k_0}$ par rapport à $A_k \equiv \beta\epsilon_k$.
28. Montrer que
$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_k^2 \rangle - n_k^2 &= n_k(n_k+1) & (35) \\ \langle \hat{n}_k \hat{n}_{k'} \rangle - n_k n_{k'} &= 0 \qquad \text{pour} \quad k \neq k' & (36) \end{aligned}$$
on pourra considérer les dérivées secondes de la fonction de partition $Z_{k_0}$ par rapport à $A_k \equiv \beta\epsilon_k$ et $A_{k'} \equiv \beta\epsilon_{k'}$.
29. Dans le cas où le condensat est au repos, nous avons montré en Travaux Dirigés que l'opérateur impulsion totale du gaz dans l'approche de Bogoliubov est donné par
$$\hat{P}^{(0)} = \sum_{k\neq 0} \hbar k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \tag{37}$$
En utilisant l'invariance galiléenne, montrer que, pour un système avec le condensat en mouvement de vecteur d'onde $k_0$ (29), l'opérateur impulsion totale du gaz prend la forme
$$\hat{P}^{(k_0)} = \hbar k_0 N + \sum_{k\neq 0} \hbar k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \tag{38}$$
30. Exprimer la valeur moyenne de $(\hat{P}^{(k_0)})^2$ dans l'état thermique (33), en fonction des $n_k$ de l'équation (34)
31. On suppose maintenant que $v_0 \ll c$, où $c$ est la vitesse du son telle que $c^2 = \frac{\rho g}{m}$. Dans l'expression de $\langle (\hat{P}^{(k_0)})^2 \rangle$ obtenue à la question précédente, développer les $n_k$ au premier ordre inclus en $v_0$. On utilisera la relation
$$f'(\epsilon_k^{(0)}) = -\beta n_k^{(0)}(1 + n_k^{(0)}) \tag{39}$$
où la fonction $f(\epsilon)$ est définie par (34), $f'$ est sa dérivée et
$$n_k^{(0)} = f(\epsilon_k^{(0)}) \tag{40}$$

1. Nous avons omis une constante, correction quantique à l'énergie du fondamental, qui ne dépend pas de $k_0$ et ne joue pas de rôle ici.

32. Récrire le résultat de la question précédente en faisant apparaitre la quantité

$$f_n^{(0)} \equiv \frac{\sum_{k\neq 0} n_k^{(0)}(n_k^{(0)}+1)\hbar^2 k^2}{Nmk_BT} \tag{41}$$

33. À des termes en $O[(f_n^{(0)})^2]$ près, montrer alors que le résultat peut s'écrire

$$\langle (P^{(k_0)})^2\rangle = Nmk_BTf_n^{(0)} + N_s^2\hbar^2 k_0^2. \tag{42}$$

où l'on a introduit le nombre de bosons dans la fraction superfluide pour le condensat au repos :

$$N_s = N(1-f_n^{(0)}) \tag{43}$$

34. En prenant $k_0 = 0$ dans (42) donner la signification physique de $f_n^{(0)}$ définie par (41).

35. Ne pas traiter $f_n^{(0)}$ comme un infiniment petit du premier ordre serait-il compatible avec la théorie de Bogoliubov ?

## 3.2 Mélange statistique de condensats en mouvement et calcul de la “vraie" valeur moyenne de $\hat{P}^2$

Dans l'approximation de Bogoliubov dite “multi-vallée", on approxime le véritable opérateur densité du gaz à l'équilibre thermique par un *mélange statistique* de condensats en mouvement, chaque condensat en mouvement étant habillé par ses modes de Bogoliubov à l'équilibre thermique. Le poids statistique du condensat de vecteur d'onde $k_0$ est donné par la fonction de partition $Z_{k_0}$ calculée dans la sous-section précédente (question 26).

34. On rappelle que la fonction d'onde du condensat est une onde plane de vecteur d'onde $k_0$ correctement normalisée. Calculer l'énergie de Gross-Pitaevskii $E[\phi]$ (31) du condensat, en fonction de $N$, $\hbar$, $k_0$, $m$, la constante de couplage $g$ et la densité $\rho$.

35. Exprimer le *rapport* des fonctions de partition d'un condensat en mouvement et du condensat au repos $Z_{k_0}/Z_0$ en fonction de $k_0$, $\beta$, $\epsilon_k$ et $\epsilon_k^{(0)}$.

36. Montrer qu'on peut récrire ce rapport sous la forme :

$$\frac{Z_{k_0}}{Z_0} = e^{-\beta N\hbar^2k_0^2/(2m)} \exp\left\{-\sum_{k\neq 0}\ln\left[1+n_k^{(0)}\left(1-e^{-\beta\hbar k v_0}\right)\right]\right\} \tag{44}$$

37. Développer l'expression *entre accolades* $\{\ldots\}$ dans (44) au second ordre inclus en $v_0$. On rappelle que $\ln(1+x) = x - x^2/2 + O(x^3)$ lorsque $x \to 0$. Vérifier que la contribution du premier ordre en $v_0$ s'annule après sommation sur $k$, et que l'inclusion de la contribution du second ordre conduit à

$$\frac{Z_{k_0}}{Z_0} = e^{-\beta N_s\hbar^2k_0^2/(2m)}, \tag{45}$$

en utilisant le résultat (41) et la définition (43).

38. On passe maintenant à la limite thermodynamique, $N \to +\infty$ à $\rho = N/L^d$ fixé où $d$ est la dimension de l'espace. Montrer très simplement qu'en dimension un, le poids statistique des condensats en mouvement n'est pas négligeable dans cette limite. Ceci montre que le condensat peut être ‘spontanément' en mouvement à l'équilibre thermique.

39. Le raisonnement précédent s'applique-t-il en dimension trois ?

40. On revient à la dimension un. Moyenner le résultat (42) sur le poids statistique (45). On se place à la limite thermodynamique donc on pourra remplacer la somme sur $k_0$ par une intégrale. On rappelle que

$$\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^2 e^{-x^2/(2\sigma^2)}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-x^2/(2\sigma^2)}} = \sigma^2 \tag{46}$$

pour $\sigma > 0$. En déduire la ‘vraie' valeur de $\langle\hat{P}^2\rangle$, et finalement la ‘vraie' valeur de la fraction normale en dimension un, selon la définition (28). On doit trouver un résultat on ne peut plus simple...