

# Une transition liquide-gaz pour des bosons à 1D en interaction attractive

Examen “Fluides quantiques” M1 ICFP 2016-2017

Alice Sinatra et Kris Van Houcke

## 1 Modèle

Nous considérons un gaz homogène unidimensionnel composé de  $N$  bosons de masse  $m$ , non relativistes et sans spin, qui interagissent par un potentiel à deux corps de portée nulle  $V_{ij} = g\delta(x_i - x_j)$ , où  $x_i$  et  $x_j$  sont les positions des particules et  $g$  est une constante que nous supposons négative  $g < 0$ . Le système, à l'équilibre à une température  $T$ , est enfermé dans une boîte de longueur  $L$  avec des conditions aux limites périodiques.

### 1.1 Solution par ansatz de Bethe dans l'espace libre

Le modèle de  $N$  bosons à 1D en interaction par un potentiel de Dirac attractif est intégrable par ansatz de Bethe. La solution dans l'espace libre (sans boîte de quantification) est particulièrement simple et sera le point de départ de notre étude. On trouve dans l'espace libre que chaque état propre du système est composé d'une collection de  $i$  fragments, l'entier  $i$  prenant une valeur arbitraire entre 1 et  $N$ . Chaque fragment est formé d'un certain nombre  $n_i$  d'atomes liés ( $n_i$ -mères) où  $n_i$  peut varier entre 1 et  $N$ , et a une impulsion du centre de masse bien définie  $k_i$ . L'énergie des états propres s'écrit

$$E = \sum_{i=1}^{\text{\#fragments}} \left[ E_0(n_i) + \frac{\hbar^2 k_i^2}{2n_i m} \right] \quad \text{avec} \quad E_0(n) = -\frac{mg^2}{24\hbar^2} n(n^2 - 1) \quad (1)$$

Ici  $E_0(n)$  représente l'énergie interne du  $n$ -mère et  $\frac{\hbar^2 k_i^2}{2nm}$  son énergie cinétique. On remarquera que l'énergie d'interaction, bien qu'elle soit prise en compte, n'apparaît pas dans le spectre. D'une part l'intégrabilité impose que la diffusion des  $n$ -mères l'un sur l'autre est purement élastique, et d'autre part l'interaction entre  $n$ -mères n'affecte pas le spectre (1) car les  $n$ -mères qui rentrent en collision sont asymptotiquement libres.

*Nous allons dans la suite donner les conditions sous lesquelles nous pouvons utiliser ce même spectre en présence d'une boîte de quantification. Pour ce faire, et pour la suite de notre étude, nous avons besoin d'outils pour décrire plus simplement que par l'ansatz de Bethe au moins deux cas limites : le dimère d'une part et le  $N$ -mère avec  $N \gg 1$  d'autre part. Nous avons aussi besoin de quelques résultats de la théorie de la diffusion à 1D.*

## 1.2 Le dimère

On cherche l'état lié à deux corps (dimère) pour deux atomes à 1D qui interagissent par un potentiel de Dirac attractif  $V_{ij} = g\delta(x_i - x_j)$  avec  $g < 0$ .

1. Pour des atomes froids confinés à une dimension, la constante  $g$  est liée à la longueur de diffusion  $a$  (équivalent à 1D de la longueur de diffusion en onde  $s$  à 3D) par la relation

$$g = -\frac{\hbar^2}{ma} \quad (2)$$

À un facteur numérique près, retrouver la relation (2) entre  $g$  et  $a$  par analyse dimensionnelle. Trouver la relation équivalente à 3D.

2. Écrire l'équation de Schrödinger  $H\phi(x) = E\phi(x)$  pour la fonction d'onde  $\phi(x)$  du mouvement relatif des deux atomes. On fera apparaître  $a$  dans le hamiltonien et on redéfinira l'énergie convenablement.
3.  $\phi(x)$  doit être une fonction continue. Expliquer pourquoi dans notre cas  $\phi'(x)$  est discontinue en  $x = 0$ .
4. Résoudre l'équation de Schrödinger et trouver la fonction d'onde  $\phi(x)$  de l'état lié correctement normalisée.
5. Calculer l'extension  $l$  du dimère (mi-largeur à la hauteur relative  $1/e$  de  $\phi(x)$ ) et son énergie  $E$  en fonction de  $a$ . On doit trouver  $l = 2a$ .

## 1.3 Problème de diffusion

Nous regardons toujours le problème à deux corps, cette fois avec une énergie positive, pour calculer l'amplitude de diffusion de notre potentiel en Dirac attractif.

1. Écrire l'équation de Schrödinger  $H\phi(x) = E\phi(x)$  pour la fonction d'onde  $\phi(x)$  du mouvement relatif des deux atomes. On fera apparaître  $a$  dans le hamiltonien et on posera  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{m}$ .
2. On prend l'ansatz d'une onde incidente et une onde réfléchie pour  $x < 0$  et d'une onde transmise pour  $x > 0$  :

$$\phi(x < 0) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad ; \quad \phi(x > 0) = Ce^{ikx} \quad (3)$$

Écrire les conditions de raccordement en zéro pour  $\phi$  et  $\phi'$ .

3. Exprimer  $B$  et  $C$  en fonction de  $A$  et déduire l'expression des coefficients de transmission et de réflexion en fonction de  $ka$ .
4. En déduire qu'à basse énergie  $ka \ll 1$ , la diffusion tend vers la réflexion totale. Ceci fait qu'à 1D, au contraire du cas 3D, le régime de Born est atteint à haute énergie  $\frac{1}{ka} \ll 1$ .
5. Commenter le fait qu'à 1D il n'est pas nécessaire de régulariser le potentiel en Dirac.

## 1.4 Le $N$ -mère avec $N \gg 1$ dans l'approximation de champ moyen

Nous allons trouver l'état fondamental du  $N$ -mère avec  $N \gg 1$  dans l'approximation de champ moyen. À partir du hamiltonien de  $N$  atomes à 1D en interaction

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} g\delta(x_i - x_j) \quad (4)$$

on va considérer l'ansatz variationnel

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle \otimes \dots \otimes |\phi\rangle \quad (5)$$

et minimiser l'énergie moyenne  $E$

$$E = N \int_{\mathbb{R}} dx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\phi}{dx} \right|^2 + \frac{g}{2} (N-1) |\phi|^4 \right\} \quad (6)$$

1. On va sortir un préfacteur de  $E$  par analyse dimensionnelle. En introduisant la fonction  $\psi$  et la longueur  $\xi$  telles que

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\xi}} \psi \left( \frac{x}{\xi} \right) \quad (7)$$

calculer  $\xi$  pour que l'énergie cinétique et l'énergie de champ moyen dans (6) aient le même coefficient.

2. Réexprimer la fonctionnelle énergie  $E$  sous la forme

$$E[\phi, \phi^*] = \frac{mg^2}{\hbar^2} N(N-1)^2 \epsilon[\psi, \psi^*] \quad (8)$$

(on rappelle que  $g < 0$ ) et donner l'expression de la fonctionnelle  $\epsilon[\psi, \psi^*]$  dans laquelle toutes les constantes ont disparu.

3. Pour prendre en compte la contrainte sur la norme de  $\psi$ , on va minimiser la fonctionnelle

$$\mathcal{F}[\psi, \psi^*] = \epsilon[\psi, \psi^*] - \nu \int |\psi|^2 \quad (9)$$

où  $\nu$  est un multiplicateur de Lagrange.

Écrire la variation  $\delta\mathcal{F}$  en fonction des variations  $\delta\psi$  et  $\delta\psi^*$  et trouver l'équation différentielle satisfaite par le minimiseur.

4. Montrer que l'on peut récrire l'équation sur le minimiseur sous la forme

$$\psi'^2 + \psi^4 - 2|\nu|\psi^2 = 0 \quad (10)$$

(on peut se limiter à  $\psi \in \mathbb{R}$ ) quel est le signe de  $\nu$  ?

5. Résoudre l'équation (10) par quadrature. On donne

$$\forall x \in ]1, \infty[ \quad \frac{d}{dx} [\operatorname{argch}(x)] = \frac{1}{\sqrt{x^2 - 1}} \quad (11)$$

6. À partir du résultat, en réintroduisant les quantités dimensionnées et en approximant  $N-1$  par  $N$  pour  $N \gg 1$ , on trouvera :

- (a) La fonction d'onde de champ moyen du  $N$ -mère

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2\xi^{1/2}} \frac{1}{\operatorname{ch} \left[ \frac{x-x_0}{2\xi} \right]} \quad (12)$$

qui est un soliton brillant.

- (b) Le potentiel chimique de champ moyen du  $N$ -mère

$$\mu_0^{\text{cm}} = -\frac{1}{8} \frac{mg^2}{\hbar^2} N^2 \quad (13)$$

- (c) L'énergie interne de champ moyen du  $N$ -mère

$$E_0^{\text{cm}} = -\frac{1}{24} \frac{mg^2}{\hbar^2} N^3 \quad (14)$$

## 1.5 Dans une boîte avec des conditions aux limites périodiques

Si l'on introduit une boîte de quantification, le problème, toujours intégrable par ansatz de Bethe, est cependant plus compliqué. Ici nous nous restreignons à un cas limite simple dans lequel le spectre reste approximativement de la forme (1) avec la condition de quantification supplémentaire

$$k_i = \frac{2\pi q}{L} \quad \text{avec} \quad q \in \mathbb{Z} \quad (15)$$

1. La première condition de validité est que la structure interne et l'énergie des états liés doit être peu perturbée par la présence de la boîte. Pour cela on demande que l'extension des  $n$ -mères soit très inférieure à  $L$ .

En utilisant les résultats des sections précédentes, montrer que pour  $n \gg 1$  l'extension du  $n$ -mère est très inférieure à celle,  $l$ , du dimère. On se restreindra donc dans la suite à

$$\frac{L}{l} \gg 1 \quad (16)$$

*On veut maintenant montrer que la transition liquide-gaz a lieu dans le régime non dégénéré.*

2. À partir de  $E_0(N)$  calculer le potentiel chimique  $\mu_0$  du  $N$ -mère. On négligera 1 devant  $N^2$ .
3. Calculer en fonction de  $\rho = N/L$  l'énergie de Fermi  $E_F$  d'un gaz fictif de fermions à 1D sans interaction ayant la même densité de notre gaz de bosons.
4. Montrer que

$$\frac{L}{l} = \pi \left( \frac{|\mu_0|}{E_F} \right)^{1/2} \quad (17)$$

5. Expliquer pourquoi on s'attend à ce que la température critique de la transition liquide-gaz soit de l'ordre de (ou une fraction de)  $|\mu_0|$ .
6. En prenant  $k_B T_c \simeq |\mu_0|$  montrer que la condition (16) implique que la transition liquide-gaz a lieu dans le régime non dégénéré

$$\rho\lambda \ll 1 \quad \text{avec} \quad \lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \quad (18)$$

ce qui sera la deuxième condition de validité de notre étude.

7. Une troisième condition pour pouvoir utiliser le spectre (1) de l'espace libre est que les déplacements d'énergie dus aux collisions élastiques entre  $n$ -mères, qui ne sont pas nuls dans la boîte, soient négligeables devant l'énergie cinétique des  $n$ -mères. Nous nous limitons à expliciter cette condition dans la phase purement atomique. Montrer que l'inégalité

$$\frac{\lambda}{l} \ll 1 \quad (19)$$

garantit que la diffusion entre atomes thermiques se fait dans l'approximation de Born.

8. Montrer que l'inégalité (19) est vérifiée pour des températures de l'ordre de  $k_B T_c \sim |\mu_0|$  dès que  $N \gg 1$ .
9. Sachant que l'on est dans le régime de Born, expliquer pourquoi l'énergie d'interaction d'un atome avec le reste du gaz est  $\rho g$ .
10. Montrer que

$$\frac{\rho|g|}{k_B T} = \frac{1}{\pi} (\rho\lambda) \left( \frac{\lambda}{l} \right) \quad (20)$$

ce qui est  $\ll 1$  sous les conditions (18) et (19).

## 2 La transition liquide-gaz

Sous les conditions (16), (18) et (19) que nous avons identifiées, nous pouvons donc considérer chaque configuration (état propre) du système comme un ensemble  $\{\mathcal{N}_n\}$  de  $\mathcal{N}_n$   $n$ -mères indiscernables, à l'équilibre dans le régime non dégénéré, avec  $\sum_{n=1}^N n\mathcal{N}_n = N$ .

### 2.1 Calcul de la température critique

1. Calculer la fonction de partition d'un atome à l'équilibre à 1D dans la boîte avec conditions aux limites périodiques, en fonction de  $\lambda$  et de  $L$ . On se placera dans la limite  $L \gg \lambda$  et l'on remplacera la somme obtenue par une intégrale que l'on calculera.
2. Calculer de même la fonction de partition d'un  $n$ -mère (de masse  $nm$ ) à l'équilibre dans la boîte 1D avec conditions aux limites périodiques, en fonction de  $E_0(n)$ ,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $\lambda$ ,  $n$  et  $L$ . Remarquer que les fonctions de partitions externe et interne se factorisent.
3. Écrire la fonction de partition d'un gaz parfait de  $\mathcal{N}_n$   $n$ -mères indiscernables à l'équilibre dans le régime non dégénéré.
4. La fonction de partition du système est la somme des fonctions de partitions  $Z_{\text{conf}}$  des différentes configurations

$$Z = \sum_{\text{conf}} Z_{\text{conf}} \quad (21)$$

Écrire  $Z$  en remplaçant  $Z_{\text{conf}}$  par son expression.

Si  $N$  n'est pas trop grand, on peut effectuer une étude numérique du système par énumération des configurations. Pour  $N = 100$  et  $L = 100l$  on voit alors que l'énergie libre  $F = -k_B T \ln Z$  en fonction de  $T/T_F$  (où  $T_F = E_F/k_B$ ) présente un point quasi anguleux pour  $T_c \simeq 105T_F$ . On voit aussi que pour  $T > T_c$  le système est essentiellement composé d'atomes avec quelques dimères, et pour  $T < T_c$  le système est essentiellement composé d'un gros  $n$ -mère avec quelques atomes. Nous allons estimer  $T_c$  en considérant deux phases pures : une phase atomique qui prévaut pour  $T > T_c$  et une phase à un  $N$ -mère qui prévaut pour  $T < T_c$ .

5. Montrer qu'on obtient ainsi l'équation suivante pour la température critique ( $\beta_c = 1/k_B T_c$ ) :

$$e^{-\beta_c E_0(N)} \frac{L\sqrt{N}}{\lambda_c} = \frac{1}{N!} \left(\frac{L}{\lambda}\right)^N \quad (22)$$

6. Prendre le logarithme et développer pour  $N$  grand, sous l'hypothèse que  $\ln(L/\lambda_c) = O(\ln(N))$ , pour obtenir

$$\frac{1}{3}\beta_c |\mu_0| - \ln\left(\frac{e}{\rho\lambda_c}\right) = O\left(\frac{\ln N}{N}\right) \quad (23)$$

7. Montrer qu'en négligeant les termes de limite nulle pour  $N$  grand on obtient l'équation implicite

$$\frac{2}{3}\beta_c |\mu_0| + \ln\left(\frac{2}{3}\beta_c |\mu_0|\right) = \ln\left(\frac{\pi e^2 |\mu_0|}{6E_F}\right) \quad (24)$$

8. Montrer qu'on a alors

$$\frac{2}{3}\beta_c |\mu_0| = W\left(\frac{\pi e^2 |\mu_0|}{6E_F}\right) \quad (25)$$

où  $W$  est la fonction de Lambert, fonction inverse de  $x \mapsto xe^x$  pour  $x \geq -1$ . Pour les paramètres  $N = 100$  et  $L = 100l$  ceci donne une estimation analytique de la température critique  $T_c^{\text{analy}} \simeq 106T_F$  très proche de la valeur numérique  $T_c \simeq 105T_F$ .

## 2.2 Peut-on négliger la fraction d'atomes dans la phase liquide ?

Comme dans la section 1.4, nous allons décrire la phase liquide dans l'approximation de champ moyen et nous allons déterminer ses excitations élémentaires. Le point de départ est l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps pour la fonction d'onde  $\phi(x, t)$  de champ moyen du  $N$ -mère :

$$i\hbar\partial_t\phi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\phi(x, t) - |g|N|\phi(x, t)|^2\phi(x, t) - \mu_0^{\text{cm}}\phi(x, t) \quad (26)$$

1. Comme dans la méthode de Bogoliubov habituelle, calculer le système linéaire couplé donnant la dérivée temporelle des fluctuations  $\delta\phi(x, t)$  et  $\delta\phi^*(x, t)$ , considérées comme des variables indépendantes, autour de la solution stationnaire  $\phi_0(x) \in \mathbb{R}$  (qui est, comme nous l'avons vu, un soliton brillant localisé autour de  $x = x_0$ ).
2. On cherche des modes propres sous la forme  $\delta\phi(x, t) = U(x)e^{-i\omega t}$  et  $\delta\phi^*(x, t) = V(x)e^{-i\omega t}$ , avec  $\omega > 0$ . Donner le système différentiel auquel  $U(x)$  et  $V(x)$  obéissent.
3. Loin du soliton on peut remplacer  $\phi_0$  par 0 dans le système différentiel. Montrer alors que, pour  $\hbar\omega > |\mu_0^{\text{cm}}|$  (on admet qu'il n'y a pas de solutions pour  $\hbar\omega < |\mu_0^{\text{cm}}|$ )  $U(x)$  est une somme d'ondes planes de nombre d'onde  $k$ , et que  $V(x)$  est nul. En déduire que la relation de dispersion de Bogoliubov vaut

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_0^{\text{cm}} \quad (27)$$

4. En déduire que le spectre d'excitation présente une bande interdite, dont on donnera la largeur et une interprétation physique.
5. De quel type sont ici les excitations prédites par la méthode de Bogoliubov ? Cette méthode décrit-elle toutes les excitations du système ?
6. Calculer le nombre moyen d'excitations de Bogoliubov à la température  $T$ , dans le régime  $\beta|\mu_0^{\text{cm}}| \gg 1$  et  $L \gg \lambda$ .
7. En déduire qu'à la température critique  $T_c$ , qu'on caractérisera par l'équation (23), la fraction d'atomes dans la phase liquide est donnée par

$$\left(\frac{N_{\text{at}}}{N}\right)_{T=T_c} = \frac{(\rho\lambda_c)^2}{e^3} \quad (28)$$