



HAL
open science

Etude théorique du second point critique dans le gaz de Bose

Mathieu Beau

► **To cite this version:**

Mathieu Beau. Etude théorique du second point critique dans le gaz de Bose. Physique mathématique [math-ph]. Université de la Méditerranée - Aix-Marseille II, 2010. Français. NNT: . tel-00529394

HAL Id: tel-00529394

<https://theses.hal.science/tel-00529394>

Submitted on 25 Oct 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

AIX-MARSEILLE II

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'Université d'Aix-Marseille

Spécialité : **Physique Théorique et Physique Mathématique**

préparée au laboratoire **Centre de Physique Théorique**

École Doctorale de **Physique et Science de la Matière (ED 352)**

Titre:

Etude théorique du second point critique dans le gaz de Bose

présentée et soutenue publiquement
par

Mathieu Beau

le 01/10/2010

Jury

M. Jean-Bernard Bru,	Rapporteur
Mme. Adeline Crépieux,	
M. Markus Holzmann,	
M. Claude-Alain Pillet,	Président du Jury
M. Daniel Ueltschi,	Rapporteur
M. Jakob Yngvason,	
M. Valentin Zagrebnov,	Directeur de Thèse

Résumé

Il est bien connu que pour un gaz parfait de Bose dans une boîte bi-dimensionnelle et dans un piège harmonique uni-dimensionnel, il n'existe pas de condensat de Bose-Einstein à température strictement positive. De plus le théorème de Bogoliubov-Hohenberg [31], [32], prouve que pour un gaz de Bose (avec ou sans interaction) dans un système homogène bi-dimensionnel, il est impossible d'obtenir un condensat sur le mode fondamental. Toutefois, il est montré dans [33] qu'il n'est pas interdit que le condensat soit un *condensat généralisé de type III* [28] ou *quasi-condensat* [18]. En d'autres termes, bien qu'aucun mode ne peut être macroscopiquement occupé, il se pourrait qu'un ensemble de modes dans une bande d'énergie proche du mode fondamental puisse contenir un nombre macroscopique de particules. Depuis le début des années 2000, de nombreuses expériences ont été réalisées pour observer et comprendre les propriétés des condensats dans des milieux de basses dimensions [15], [16], [17].

Ainsi pour répondre, dans une première approche, à ces ambiguïtés sur l'existence et la nature du condensat en basses dimensions, nous analysons dans cette thèse le cas du gaz parfait de Bose pour des modèles de boîte et de pièges harmoniques anisotropes, en particulier exponentiellement anisotropes [27] pour lesquels il existe un condensat de Bose-Einstein (généralisé [28]) pour une densité supérieure à la densité critique usuelle ρ_c (ou pour une température inférieure à la température critique usuelle T_c), mais dont la nature est modifiée selon la valeur de la densité de particules ou de la température du gaz. En d'autres termes, il existe dans ces modèles *une seconde transition* à la densité $\rho_m > \rho_c$ (ou à la température $T_m < T_c$) qui distingue deux régimes de condensation différents : un *condensat généralisé de type III* ou *quasi-condensat* et une coexistence entre un *condensat usuel* sur le mode fondamental et un *quasi-condensat saturé*. Notons qu'il existe dans l'expérience [16] et en théorie [20] une seconde transition analogue séparant un régime quasi-condensé avec des *fluctuations de phase* (et sans *fluctuations de densité*) d'un autre régime condensé sans fluctuations de phase (et avec fluctuations de densité).

Le but de cette thèse est donc de présenter un travail théorique à propos de la seconde transition dans le gaz parfait de Bose. Pour ce faire, nous développons dans le chapitre 1 une approche d'échelle qui permet de revisiter les différents concepts autour de la condensation, à savoir la condensation de Bose-Einstein généralisée de M. van den Berg, J. Lewis, J. Pulé [28], les cycles infinis de R. Feynman [8] et les corrélations à longue portée de O. Penrose et L. Onsager [9]. Cette approche nous permet de montrer l'équivalence de critères de *classification* des condensats

généralisés (type I, II, III) pour trois concepts. Ensuite nous caractérisons la seconde transitions pour le modèle d'anisotropie exponentielle, boîtes quasi-2D pour le chapitre 2 et pièges harmoniques quasi-1D pour le chapitre 3. Nous calculons les densités et températures critiques, les modifications des fractions condensées, les localisations énergétiques et les longueurs de cohérence des condensats ; puis nous discutons l'interprétation de cette transition. Dans le chapitre 4, nous analysons la seconde transition dans la représentation des cycles de bosons et nous regardons les analogies entre le gaz de Bose et les polymères via notre approche d'échelle.

Les modèles pièges et de boîtes tri-dimensionnelles exponentiellement anisotropes que nous présentons, sont, en limite thermodynamique, des cas intermédiaires entre les modèles tri-dimensionnels anisotropes conventionnels (anisotropie linéaire) et les modèles de basses dimensions, pour lesquels, pour le cas sans interactions entre particules, la notion de condensat sur le mode fondamental n'est pas évidente. Ceci donne une première approche pour le cas du gaz en faibles interactions qu'il conviendra de traiter par la suite.

Abstract

It is well known that for an ideal Bose gas in two-dimensional boxes and in one-dimensional harmonic traps, there is no non-zero temperature of Bose-Einstein condensate. In addition, the Bogoliubov-Hohenberg theorem [31], [32], shows that for a Bose gas (with or without interaction) in a homogeneous two-dimensional it is impossible to obtain a condensate on the fundamental mode. However, it is shown in [33] that it is not forbidden to have a *generalized condensate of type III* [28] or *quasi-condensate* [18] i.e. no mode is macroscopically occupied although all modes in an energy band near the fundamental mode could contain a macroscopic number of particles. Since the early 2000s, many experiments have been realized to observe and understand the properties of the condensates in low-dimensional systems [15], [16], [17].

To answer, in a first approach, these ambiguities about the existence and nature of the condensate in low dimensional systems in this thesis we analyze the case of ideal gas Bose in anisotropic boxes and in anisotropic harmonic traps, especially exponentially anisotropic [27] for which there is a Bose-Einstein (generalized [28]) for a density greater than the usual critical density ρ_c (or for a temperature below the usual critical temperature T_c) but whose nature is changed according to the value of the density of particles or the gas temperature. In other words, it exists in these models *a second transition* at the density $\rho_m > \rho_c$ (or at temperature $T_m < T_c$), which distinguishes two different condensation regimes : a condensate of *type III* or *quasi-condensate* and *coexistence* between a *normal* condensate on the fundamental mode and a saturated *quasi-condensate*. Notice that there exists, in the experiment [16] and in theory [20], a similar second transition between a quasi-condensate with fluctuation of phase (and not density fluctuation) and a condensate without fluctuation of phase (with density fluctuation).

The aim of this thesis is to present a theoretical work about the second transition for the ideal Bose gas. To do this, we develop in Chapter 1 a scaling approach that allows us to revisit different concepts around the condensation, ie the Bose-Einstein generalized van den Berg, J. Lewis, J. Pule [28], the infinite cycles of R. Feynman [8] and long range correlations O. Penrose and L. Onsager [9]. This approach allows us to show the equivalence of criteria of condensate and of classification (type I, II, III) around these three concepts. Then we characterize the second transitions for the exponential anisotropy model : quasi-2D boxes in Chapter 2 and quasi-1D harmonic traps in Chapter 3. We calculate critical temperatures and densities, condensed fractions, spatial and energy locations, spatial coherence lengths of condensates and

then we discuss the interpretation of this transition. In Chapter 4 we analyze the second transition in the cycles representation and we look analogies between the Bose gas and polymers via our scaling approach.

Thermodynamical models of three-dimensional exponentially anisotropic traps and boxes we present are intermediate cases between three-dimensional conventional anisotropic models (linear anisotropy) and low-dimensional models, for which the concept of condensate on the fundamental mode is not obvious. This gives a first approach to the case of gas in weak interactions that needs to be studied subsequently.

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier Valentin Zagrebnov, mon directeur de thèse qui pendant ces trois années a su me faire découvrir le mélange de Physique et de Mathématiques, dont la recherche passionnante et riche a son clairement son utilité dans l'Histoire de ces deux domaines. La Physique Mathématique est un couple qui traverse parfois des crises, c'est un couple située entre deux mondes si proches et si éloignés en même temps. Comme on dit, s'asseoir entre deux sièges n'est pas le plus confortable mais c'est toujours plus stimulant que d'être oisif dans un fauteuil trop commode. Je le remercie donc de m'avoir montré les subtilités du monde de la recherche et de ne pas m'avoir laissé dormir trop profondément. Je le remercie aussi de m'avoir aidé à rédaction du premier article.

Je tiens à remercier le directeur du Centre de Physique Théorique (CPT) Marc Knecht pour l'accueil du laboratoire durant l'année de master 2 et la thèse. Je voudrais remercier aussi le directeur du groupe de Physique Statistique et Matière Condensée du CPT Daniel Gandolfo qui m'a permis d'obtenir des financements pour suivre des écoles et conférences à l'étranger et en France. Je remercie aussi l'ensemble du personnel administratif, secrétaires, bibliothécaires, informaticien, qui sont nécessaires au bon fonctionnement du laboratoire. D'une manière générale je remercie les agents d'entretiens, les techniciens, le service de sécurité, qui assurent au bâtiment et au laboratoire des conditions saines et vitales.

Je remercie Jean-Bernard Bru qui a accepté d'être rapporteur de la thèse et qui m'a accueilli quelques jours dans son laboratoire pour lui présenter la thèse et discuter de manière très sympathique. Je remercie aussi D. Ueltschi d'avoir accepté d'être rapporteur et avec lequel j'ai eu quelques discussions aux cours de ses passages au CPT ou en conférences. Je veux remercier aussi l'ensemble du jury, Claude-Alain Pillet qui fut mon rapporteur de stage de master 2 et avec lequel j'ai beaucoup aimé discuter, Markus Holzmann pour m'avoir accueilli le temps d'une conférence à Grenoble et de m'avoir accordé quelques heures de discussions très utiles pour la suite de la thèse, Adeline Crépieux d'avoir accepté d'être dans le jury et qui m'a patiemment écoutée (pendant plusieurs heures..) expliquer mon travail de thèse, Jakob Yngvason que j'ai eu l'occasion de rencontrer dans plusieurs conférences et que je remercie d'être dans le jury.

Je tiens à remercier Raphael Benguria et Raymond Brummelhuis avec qui nous avons travailler avec Pierre Duclos sur un article très intéressant, grâce à eux nous avons pu terminer ce travail en hommage à Pierre. Je remercie aussi l'ensemble de mes directeurs de stage, Jean-Marc Richard du LPSC de grenoble pour la Licence et bien sûr Valery Nesvizhevsky de l'ILL de grenoble pour le Master 1 qui m'a recontacté cette année et m'a permis de terminer et de présenter notre travail, lors d'une semaine de conférence aux Houches, sur ce formidable projet GRANIT.

Ces trois ans de thèse à Marseille ont été une formidable occasion de rencontrer

de nouvelles personnes qui me sont chères. Je pense notamment à Caroline avec qui nous avons partagé de très bons moments et pour qui je ressens une amitié tout à fait unique et grande. Je la remercie pour tout ce qu'elle m'a apportée et mes pensées seront plus justes que mes mots. Je pense bien sûr à Charles et Baptiste, mes potes de tous les soirs. Nous avons apprécié ensemble la musique, le bon vin, la bonne bière, la bonne bouffe, les balades, les maths, la physique, les manifs, les soirées électorales, Stéphane Guillon, Didier Porte, Groland et Siné Hebdo. Ces deux compères tant en science que dans la vie, ont toujours été présents, à l'écoute et sont toujours en réflexion sur tout sans ne jamais accepter une vérité sous prétexte qu'elle est conforme. Ils m'ont apportés plus d'esprit critique que n'importe quels bouquins, théories, et bonnes paroles.

Pendant mes années de fac, j'ai eu la chance de rencontrer des gens passionnés par les sciences avec qui j'ai partagé autant de soirées que de discussions et débats, sur tout et n'importe quoi. Je pense à Sylvain d'une grande curiosité avec qui j'ai gribouillé le tableau de tonnes d'équations. Je pense aussi à Cyril qui m'a donné pleins de références et d'idées sur beaucoup de sujets de maths, de physique, de philosophie et je repense à notre voyage (avec Baptiste entre autre) des tulipes et des moulins (rouges?). Je pense aussi bien sûr Vincent et Edouard : année de Master indéfinissable, soirées à Grenoble et Marseille et séjour au Pouliguen, à l'image d'une très grande amitié. Je remercie David qui m'a expliqué comment détecter une particule dans un accélérateur (ce qui ne veut pas dire que j'ai compris..), et pour nos multiples discussions passionnantes sur bien d'autres sujets. Je remercie aussi Thomas que j'ai eu la chance de rencontrer la première fois à Montréal (avec notre ami Lukas), avec qui j'ai partagé des soirées à Dublin, bien arrosées de pluie (L'Irlande..), et avec qui les discussions sont toujours très riches.

Je remercie aussi tous mes potes d'enfances et d'adolescence avec qui j'ai eu la chance de garder le contact que je vois régulièrement à notre chapelle libre et laïque (grâce à nous) de Saint Julien du Sault pour se retrouver en restant toujours les mêmes. Je pense notamment à mes deux précieux potes d'enfance Séb, à Lionel, à notre musique acharnée et aussi à nos quatre cents coups, et bien sûr à Nicos, à Romain, à Marco, mes potes de lycée et de fac et qui le resterons pour longtemps.

Je remercie mon frangin Nico qui a toujours été un grand frère, il m'a fait découvrir les sciences avec un côté pratique et pragmatique, qui manque souvent aux théoriciens, et l'importance de la pédagogie dans l'enseignement et le discours. Je lui dédicace le chapitre 4 de la thèse. Je le remercie aussi de m'avoir permis de découvrir la fac avec tout ce qu'elle apporte de bon.

Je tiens tout particulièrement à remercier mes parents. Ils m'ont donné une éducation dont je suis fier et que je défends, qui m'a fait tel que je suis et que je porterai tout au long de ma vie que ce soit dans les sciences, dans l'enseignement et dans la vie privée. Je les admire car ce sont des gens intègres et honnêtes, qui m'ont toujours appris à être sincère, à avancer par ses propres moyens sans jamais écraser les autres et sans jamais oublier d'où l'on vient. Je les remercie pour tout ce qu'ils m'ont transmis et donnés, dont la valeur n'a pas d'équivalent matériel mais

une grande valeur humaine et que je saurai transmettre à mon tour, je l'espère.

Je remercie aussi toute ma famille : mes grands parents , mes tontons et tantes, mes cousins et cousines avec qui j'aurai le grand plaisir de fêter l'accomplissement de ma thèse.

Je pourrais remercier encore quelques dizaines de personnes, mais ils se reconnaîtront et je ne manquerai pas l'occasion de le leur rappeler à la prochaine rencontre.

Table des matières

Résumé	iii
Abstract	v
Table des matières	xi
Introduction	1
0.1 Une revue historique	1
0.1.1 L'origine	1
0.1.2 Les concepts autour de la condensation de Bose-Einstein	2
0.2 Recherches expérimentales et théoriques du gaz en dimensions réduites et dans des pièges anisotropes	4
0.2.1 Un engouement pour les basses dimensions	4
0.2.2 Le concept de condensation généralisée	5
0.3 Résultats actuels et questions nouvelles	8
0.3.1 Les critères de condensation et la classification	8
0.3.2 La seconde transition	9
0.4 Résultats de la thèse	10
0.4.1 Equivalence des critères et classification et méthode d'échelle, voir Chapitre 1 et [14]	10
0.4.2 Seconde transition dans le gaz de Bose dans une boîte quasi-bi-dimensionnelle, voir Chapitre 2 et [30]	13
0.4.3 Seconde transition dans le gaz de Bose dans un piège quasi-uni-dimensionnel, voir Chapitre 3 et [30]	16
0.4.4 Seconde transition pour le gaz de cycles et analogie avec les polymères, voir Chapitre 4 et [41]	18
1 Le concept d'échelle pour l'étude de la condensation de Bose-Einstein généralisée	21
1.1 Condensation de Bose-Einstein dans des boîtes parallélépipédiques	21
1.1.1 A propos du concept de condensation de Bose-Einstein généralisé	21
1.1.2 Fonction de corrélation et corrélations de longue portée	31
1.1.3 Approche de Feynman et existence des cycles longs	34
1.2 Condensation de Bose-Einstein généralisée revisitée	40
1.3 La classification de la condensation (I,II,III) implique t-elle une hiérarchie pour les cycles longs ?	43
1.3.1 Approche d'échelle pour les cycles	43

1.3.2	Hierarchie pour les cycles longs	45
1.3.3	Condensation généralisée et cycles longs dans les boîtes de Casimir	47
1.4	La classification de condensation (I,II,III) implique t-elle une hierarchie pour les corrélations?	52
1.4.1	Approche des corrélations longue portée à l'échelle	53
1.4.2	Hierarchie et anisotropie des corrélations, cohérence du condensat	55
1.5	Conclusion	58
2	La seconde transition de Bose-Einstein pour le gaz de Bose dans une boîte quasi-bi-dimensionnelle	61
2.1	Introduction	61
2.2	La seconde densité critique	63
2.2.1	Première densité critique et condensation généralisée	63
2.2.2	Modèle d'anisotropie exponentiel quasi-bi-dimensionnel (quasi-2D)	64
2.2.3	Condensat généralisé dans le plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ de l'espace des moments	65
2.2.4	Saturation du condensat généralisé sur le plan dans l'espace des moments et condensat conventionnel dans le mode fondamental	67
2.2.5	Quelle est la nature du condensat généralisé dans le plan?	68
2.3	Nature de la seconde transition	71
2.3.1	Echelle de localisation en impulsion du quasi-condensat	71
2.3.2	Interprétation et définition de la seconde transition	74
2.4	Discussion sur le modèle d'anisotropie exponentielle	76
2.5	Seconde température critique et fractions condensées	79
2.6	Localisation et longueur de cohérence des condensats	82
2.6.1	Localisation des condensats	83
2.6.2	Fonction de corrélation et longueur de cohérence	84
2.6.3	Retour sur l'interprétation de la seconde transition	87
2.7	Phénoménologie des atomes froids	89
2.8	Conclusion	95
3	Seconde transition pour le gaz de Bose dans un piège harmonique	99
3.1	Introduction	99
3.2	Second nombre critique de particules	101
3.3	Seconde température critique et fractions condensées	103
3.4	Longueur de cohérence	106
3.4.1	Fonction de corrélation intégrée (ou moyenne)	106
3.4.2	Résultats :	108
3.4.3	Longueur de cohérence	113
3.5	Perspectives	114

4	Analogie polymères et cycles de bosons : étude de la seconde transition	117
4.1	Introduction	117
4.2	Gaz de cycles de Bose	118
4.3	Rappels sur la seconde transition	121
4.4	Seconde transition pour le gaz de cycles de bosons	122
4.4.1	Transition de l'échelle pour les cycles longs	122
4.4.2	Rayon de corrélation des cycles de bosons	124
4.5	Analogie entre les polymères et les cycles	127
4.5.1	Description des chaînes idéales et conformation statique	128
4.5.2	conformation statique ("figée") des cycles de bosons	132
4.5.3	Analogie gaz de cycles/solution de polymères	133
4.6	Perspectives	136
5	Conclusion	139
5.1	Résultats	139
5.2	Perspectives	140
5.2.1	Méthode d'échelle	140
5.2.2	La seconde transition pour un gaz de Bose quasi-uni et quasi-bi-dimensionnel	141
5.2.3	Analogie polymères/cycles de bosons et seconde transition	142
	Bibliographie	143

TABLE DES MATIÈRES

Introduction

0.1 Une revue historique

0.1.1 L'origine

De 1924 à 1925 A. Einstein proposa dans deux articles maintenant célèbres [1] (voir [2] pour une version traduite de l'Allemand au français), une théorie quantique du gaz parfait de Bose, c'est à dire du gaz de particules massives identiques, indiscernables et sans interactions entre elles. Pour ce faire, il s'appuya sur l'analogie matière/rayonnement via l'idée de dualité onde/corpuscule présentée dans la thèse de de Broglie soutenue en 1924 et sur la théorie du gaz de photons proposée par S.N. Bose en 1924. Dans son deuxième article paru en 1925 il découvrit dans les équations un phénomène de saturation du gaz de Bose pour une densité de particules finie, que l'on nomme aujourd'hui *densité critique*, qui dépend de la température du gaz. Ainsi Einstein formula l'hypothèse suivante (reformulé ici, voir chapitre 1 section 1.4 pour la formulation historique) : pour dépasser la densité critique à partir de laquelle le gaz de Bose sature, le surplus de densité se dispose dans le niveau d'énergie fondamental, c'est à dire le niveau d'énergie nulle. Autrement dit pour une densité de particules supérieure à la densité critique, il doit y avoir un nombre de particules égale à la différence de ces deux densités multipliées par le volume de la boîte qui n'ont aucune énergie cinétique, c'est à dire qui ne bougent pas. Malgré la beauté de cette hypothèse, nouvelle car purement quantique, lui même en doutait comme il l'écrivait en 1924 à P. Ehrenfest (on peut trouver un commentaire historique et la référence de cette citation dans l'article suivant [3] et voir la première page du chapitre 3). Les treize premières années qui suivirent la formulation de cette hypothèse ne furent pas sans controverses puisque G. Uelhenbeck en 1927 critiqua l'article d'Einstein en expliquant que mathématiquement il ne pouvait pas y avoir de condensat sur le mode fondamental étant donné que le processus de saturation du gaz n'était pas valide ; il suffit de varier la température pour changer la densité de particule et vice et versa. Il fallut attendre 1938 pour réactualiser l'idée d'Einstein, appelée dès lors la *condensation de Bose-Einstein*, grâce à l'article de F. London [4] qui reformula et redémontra l'hypothèse de condensation via un argument d'échelle pour le comportement du potentiel chimique vu comme une solution de l'équation donnant la valeur de la densité de particule plus grande que la densité critique. La raison de cet intérêt soudain concernant la théorie du gaz quantique de Bose sans interaction et le phénomène de condensation de Bose-Einstein venait des découvertes du phé-

nomène de superfluidité de l'hélium 4 par P. Kapitsa, J. F. Allen, et D. Misener en 1937. Cette phase superfluide apparaît en dessous d'un certain point critique dit le *point lambda* pour une température de $T_\lambda = 2.17K$ autour de laquelle, W. Keesom le découvrit expérimentalement en 1927, la chaleur spécifique du liquide varie en pic avec la forme de la lettre grec lambda que l'on calligraphie de la manière suivante λ . Il appela Hélium I le liquide au dessus de T_λ et Hélium II en dessous. London dans son article comprit que les deux phénomènes de condensation de Bose-Einstein et de superfluidité de l'Hélium 4 étaient reliés, en vertu des ressemblances entre ces deux-ci. En effet il découvrit que pour le modèle du gaz parfait de Bose avec des particules de même masse que l'hélium 4, il existe une température de condensation de valeur $T_c = 3.13K$ très proche de T_λ . De plus il remarqua que la chaleur spécifique du gaz présente autour de T_c une variation ressemblante aux courbes obtenues expérimentalement pour un gaz d'Hélium 4. Les recherches théoriques et expérimentales pour comprendre le lien entre ces deux phénomènes ne faisaient que commencer et sont encore d'actualité de nos jours. La première preuve expérimentale de présence d'un condensat de Bose-Einstein dans l'Hélium superfluide a eu lieu en 1975 dans des expériences de diffusion profondément inélastique de neutron (voir [5] pour les remarques historiques sur ce sujet) et il a fallu attendre 1995 pour observer directement un condensat de Bose-Einstein pour des atomes froids de Rubidium 87 [6] et de Sodium 23 [7]. Depuis 1995 on constate un renouveau de recherche concernant les condensats de Bose-Einstein en vertu de l'intérêt que constituent ces objets à la fois macroscopiques et quantiques.

0.1.2 Les concepts autour de la condensation de Bose-Einstein

La poursuite des recherches sur la condensation de Bose-Einstein à partir de 1938 ont été très riches, et notamment parce que le lien avec la superfluidité n'est pas évidente à cause de la présence de fortes interactions entre les atomes d'Hélium.

En 1953, R. P. Feynman a proposé un nouveau concept pour décrire le gaz de Bose basé sur la formulation de la mécanique quantique par intégrale de chemin, [8]. Il propose en effet de réécrire la fonction de partition canonique et grand-canonique décrivant la statistique du gaz à partir des propriétés de symétrie des fonctions propres du problème à N corps, celles-ci n'étant pas modifiées par permutations cycliques de ses arguments. Autrement dit lorsque l'on a un gaz de N bosons dans une boîte, si vous permutez spatialement deux bosons la fonction d'onde décrivant les N bosons n'est pas modifiée, et il en est de même si vous permutez 3 bosons ou 4 bosons, etc jusqu'à N bosons. Lorsque l'on permute j arguments les uns entre les autres, on procède à ce que l'on appelle un cycle de permutations de taille j . Il existe donc une combinatoire décrivant toutes les classes de permutations, possible de ces N arguments et donc une combinatoire basée sur ce groupe de permutations symétriques S_N pour la fonction de partition. Par exemple pour 3 particules, on peut permuer chaque particule avec elle même ou deux particules entre elles en permutant la troisième avec elle même ou les trois particules. Du point de vue de

Feynman, la fonction de partition d'un système de N bosons s'écrit comme une somme sur toutes ces classes possibles de permutations de S_N où chacun des cycles de permutations est vu comme une intégrale de chemin type processus de Wiener, où la partie cinétique est vue comme un mouvement Brownien avec une loi de diffusion Gaussienne pour un temps imaginaire $j\beta$ avec j la taille du cycle et β l'inverse de la température à la constante de Boltzmann près. On peut ainsi écrire la probabilité pour une particule d'appartenir à les cycles de taille j ainsi que la densité de particules dans les cycles de taille j . Feynman proposa un critère équivalent à la condensation de Bose-Einstein en expliquant que lorsqu'une partie macroscopique de particules occupe le niveau d'énergie fondamentale, la probabilité positive de former des cycles infinis en limite thermodynamique (lorsque le volume et le nombre de particules tendent vers l'infini avec le rapport des deux constants), d'où une valeur positive dans cette limite pour la densité de particules dans les cycles infinis. Il s'appuie sur cette hypothèse pour montrer que pour un gaz en interaction, tel que l'Hélium 4 bien sûr, lorsque l'on se trouve à basse température critique on a un condensat de Bose-Einstein, sous réserves de certaines d'approximations judicieuses [8].

Parallèlement en 1956, O. Penrose et L. Onsager ont formulé une théorie de condensation de Bose-Einstein générale au sens où elle s'applique aux cas de gaz de Bose en présence d'interaction entre les particules [9]. Le principe de la théorie se base sur l'objet mathématique suivant : la matrice densité réduite. On connaît usuellement l'opérateur matrice densité qui permet de calculer les moyennes statistiques (classiques ou quantiques) des observables pour un système donné, par exemple le gaz de Bose. Notons que la trace de cet opérateur est trivialement égale à l'unité puisque les valeurs propres de cet opérateur définissent les probabilités d'accéder aux états microscopiques du système. Si Penrose et Onsager ont introduit la matrice densité réduite, c'est justement parce que la condensation de Bose-Einstein est un état microscopique de probabilité non nulle sous certains paramètres thermodynamiques. La matrice densité réduite est définie comme le produit du nombre de particules N par une trace partielle sur $N - 1$ arguments de la matrice densité, on trouve donc un opérateur de trace égale à N qui possède des valeurs propres définissant des états microscopiques du système. Le critère de Penrose et Onsager dit qu'il y a condensation de Bose-Einstein si la plus grande valeur propre de la matrice densité réduite est de l'ordre de N . Ce concept est utilisé pour beaucoup d'autres problèmes de transition de phase, notamment depuis le travail de C. N. Yang en 1962 pour les supraconducteurs [10] et encore bien d'autres domaines tel que le modèle d'Ising [11]. Ce *paramètre d'ordre* est appelé en anglais "Off-Diagonal-Long-Range-Order" (ODLRO), ce qui traduit donne : ordre longue portée hors diagonale que nous nommerons *ordre à longue portée*. Dans l'article de 1956 Penrose et Onsager ont donné plusieurs formulations de ce critère et notamment la version formulée en 1962 par Yang fut la suivante : en représentation de coordonnées spatiales pour un gaz de Bose canonique ou grand-canonique dans une boîte avec les conditions périodiques, la matrice densité réduite étant fonction de deux points spatiaux x et

x' , si en limite thermodynamique la valeur de cette fonction lorsque $\|x - x'\| \rightarrow \infty$ est strictement positive, alors nous avons un ordre à longue portée et par définition condensation de Bose-Einstein. L'interprétation physique de ce critère est la suivante : la matrice densité réduite représentée dans l'espace réel est en fait la fonction de corrélation entre deux points x et x' , ainsi lorsque le système présente un ordre à longue portée, cela signifie que si nous mesurons les corrélations quantiques entre deux points à l'infini (après la limite thermodynamique, mais nous y reviendrons) nous obtiendrons une valeur positive, en somme le système est cohérent dans tout l'espace.

Dans leur article [9], Penrose et Onsager ont établi un lien a été fait entre le critère de présence de cycles infinis et de corrélation à longue portée en s'appuyant sur les approximations faites par Feynman dans son article de 1953. Il s'avère que sous ces approximations ces deux critères sont équivalents mais dans le cas général rien n'est prouvé encore aujourd'hui et il semblerait que cela ne soit pas vrai en général mais plutôt pour le cas du gaz en faible interaction d'après D. Ueltschi [12] et assurément pour le gaz parfait dans des boîtes isotropes [13] et comme nous allons le montré dans cette thèse, pour le gaz parfait dans des boîtes anisotropes [14].

0.2 Recherches expérimentales et théoriques du gaz en dimensions réduites et dans des pièges anisotropes

Depuis les premières observations de condensats de Bose-Einstein pour les atomes froids en 1995 [6], [7], il existe un nombre considérable de recherches expérimentales et théoriques sur les condensats (basses dimensions, rotations, dynamique, interférences, pièges optiques, fermions...). Il s'agira dans cette thèse de se concentrer sur les recherches concernant les basses dimensions ou plutôt les milieux tri-dimensionnels très anisotropes pour comprendre la structure des condensats dans ces systèmes particuliers.

0.2.1 Un engouement pour les basses dimensions

En 1996 et 1997 W. Ketterle et N. J. van den Druten [15] ont étudié d'un point de vue théorique et numérique la possibilité, à nombre de particules fini, d'obtenir un condensat de Bose-Einstein dans un gaz parfait de Bose dans des pièges harmoniques uni-dimensionnels ou des boîtes uni- ou bi-dimensionnelles avec l'hypothèse d'une condensation de Bose-Einstein en deux étapes, le condensat pouvant éventuellement se répartir sur plusieurs modes. En limite thermodynamique il est impossible pour le gaz parfait d'obtenir dans ces cas un condensat, c'est pour cela qu'ils se sont limités à un nombre fini de particules tout en le gardant suffisamment grand pour obtenir une description statistique à la Bose-Einstein. En 2001, W. Ketterle et al [15] on réalisé un piège à une ou deux dimensions et toute une nouvelle physique du gaz de Bose et

des condensats en basses dimensions a commencé à émerger. Par exemple, à partir de 2003, l'équipe d'A. Aspect [16] commença à étudier les propriétés de cohérence des condensats très allongés (dit uni-dimensionnels ou quasi-uni-dimensionnels) et à partir de 2005 l'équipe de J. Dalibard [17] s'est intéressé aux condensats aplatis (dit bi-dimensionnels ou quasi-bi-dimensionnels) ; pour trouver un large domaine de référence voir [18] et [19]. Les phénomènes de condensation en dimensions réduites ou plutôt en milieux très anisotropes sont différents de ceux observables dans les milieux tri-dimensionnels isotropes. Dès 2000, des publications théoriques [20] prédisaient des comportements des condensats allongés différents d'un point de vue cohérence quantique (fluctuation de phase du point de vue optique atomique) à partir de la température de condensation mais supprimée pour une seconde température dite de phase en dessous de laquelle on observe un condensat usuel avec une fluctuation de densité anormale. De même pour les condensats aplatis dès 2000 des publications théoriques ont prédit des observations possibles d'une transition superfluide dite transition Berezinskii-Kosterlitz-Thouless prédite dans les années 1970 [21], [22] pour les milieux bi-dimensionnels avec présence d'interactions entre les atomes. Il existe notamment une revue détaillée des résultats à propos de ces phénomènes de basses dimensions [23].

0.2.2 Le concept de condensation généralisée

Face à toutes ces recherches sur les basses dimensions, le premier objectif de cette thèse était de réactualiser un concept qui date d'une trentaine d'années permettant de généraliser l'étude de la condensation de Bose-Einstein dans les milieux anisotropes.

À l'origine, le concept de condensation généralisée a été introduit par M. Girardeau en 1960 [24] suite à l'étude d'un gaz uni-dimensionnel de bosons impénétrables. En ce qui concerne le cas du gaz sans interactions, tout commença avec H. Casimir en 1968 [25] qui étudia la condensation de Bose-Einstein pour un gaz parfait de Bose dans des boîtes anisotropes avec un modèle d'anisotropie algébrique : $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ avec $L_1 = V^{1/2}$, $L_2 = V^{\alpha_2}$, $L_3 = V^{\alpha_3}$ et $\alpha_2 + \alpha_3 = 1/2$, de sorte que le produit des trois longueurs soit égal au volume V . Il s'est aperçu pour ce type de boîtes que même si la densité critique n'est pas modifiée, le condensat ne se répartit pas uniquement sur le mode fondamental mais sur un ensemble infini de modes sur l'axe d'anisotropie maximale. Ce système permet donc de *fragmenter* le condensat. En conséquence il a fallu repenser le concept de condensation au sens d'occupation macroscopique d'un seul mode. Ce fut ainsi le travail de M. van der Berg, J. Lewis et J. Pulè de 1981 à 1986 qui ont proposé [26], [27], [28], [29] une définition générale pour la condensation d'un gaz de bosons dite *condensation généralisée* pour un gaz parfait de Bose grand-canonique (Λ, β, μ) avec les conditions périodiques, où $\beta = 1/k_B T$ (k_B est la constante de Boltzmann, T est la température) et μ est le potentiel chimique, dans des boîtes parallélépipédiques quelconques

$\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3 \subset \mathbb{R}^3$ de volume $|\Lambda| = V$:

$$\rho_0 = \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| \leq \eta} \rho_k = \rho - \rho_c.$$

Ils distinguent trois types de condensations possibles en ce sens :

(i) type I si le condensat est réparti sur un nombre fini de modes macroscopiquement occupés.

(ii) type II si le condensat est réparti sur un nombre infini de modes macroscopiquement occupés.

(iii) type III si aucun mode n'est macroscopiquement occupé bien que la valeur de la densité du condensat généralisé est positive.

Le dernier type de condensat est le plus intrigant et nous allons dans cette thèse analyser sa structure faire le lien entre la classification de van den Berg-Lewis-Pulé et celle présentée dans [18].

Dans le cas du gaz parfait dans une boîte de Casimir $\Lambda = V^{\alpha_1} \times V^{\alpha_2} \times V^{\alpha_3}$, $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$, pour des boîtes peu anisotropes ($\alpha_1 < 1/2$) elle provient de la condensation de bosons sur le seul niveau fondamental, mais dès que l'anisotropie devient plus importante ($\alpha_1 = 1/2$), le condensat se réparti sur une infinité de modes proches du niveau fondamental et pour des fortes anisotropies ($\alpha_1 > 1/2$) elle provient d'une infinité de modes qui ne sont pas macroscopiquement occupés mais qui forment un "agglomérat" de bosons autour du fondamental. L'observation de condensats fragmentés et de quasi-condensats (condensat généralisé de type III) motive les présentes recherches dans ce domaine.

Ce qui est surprenant c'est que ce concept de Physique Mathématique était, d'une certaine façon, en avance sur les expérimentations ainsi que sur les théories décrivant les gaz en milieux très anisotropes, notamment parce que la transition T_ϕ observée et prédite dans les milieux quasi-uni-dimensionnels [16], [20] possède un analogue dans la formulation de van den Berg, Lewis et Pulé. En effet, en 1983 [27], van den Berg proposa un modèle de boîtes tri-dimensionnelles exponentiellement anisotropes dans deux directions pour définir une seconde densité critique ρ_m séparant un régime de condensat généralisé de type III (pour $\rho_c < \rho < \rho_m$) vers un régime de condensat généralisé de type I (pour $\rho > \rho_m$). Autrement dit pour avoir occupation d'un seul état macroscopiquement, et donc retrouver un condensat type Bose-Einstein usuel, on doit dépasser une densité critique supérieure à la densité critique usuelle ρ_c . Pour autant dans le modèle de van den Berg, le gaz reste idéal, et donc nous négligeons les interactions entre les particules, cependant nous percevons d'avantage les effets géométriques sur les propriétés cinématiques du condensat. En outre, le modèle de van den Berg n'existe pas pour des pièges harmonique quasi-uni-dimensionnels. Ceci motive nos travaux, développés dans le Chapitre 3 et dans [30].

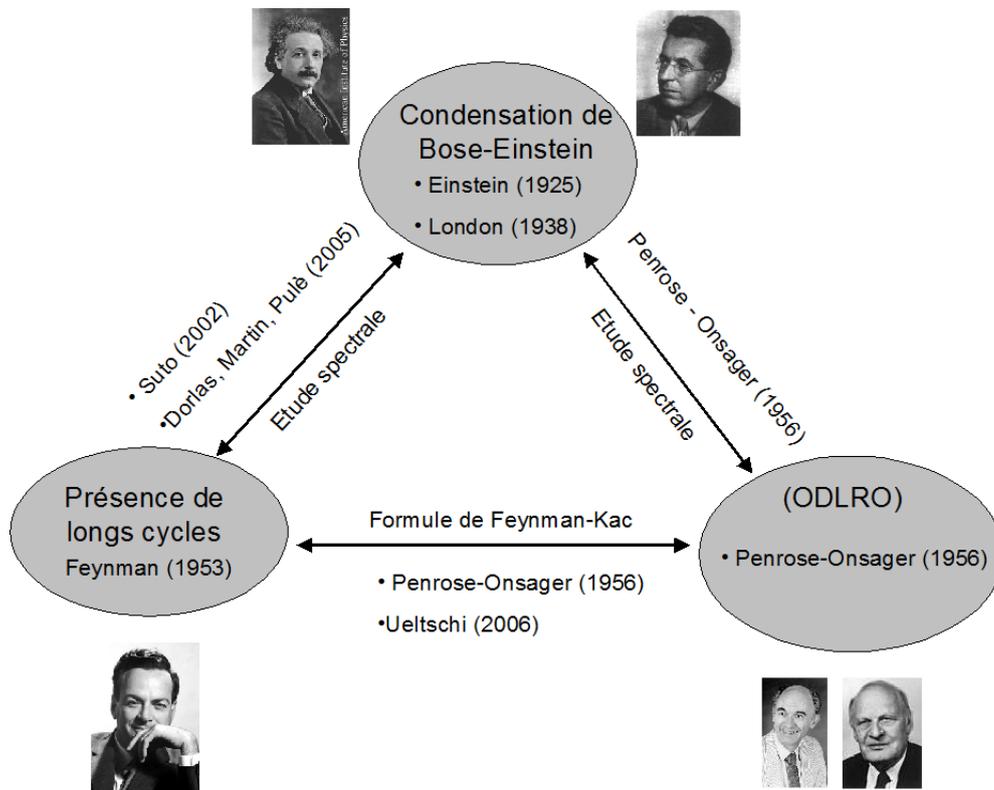


FIG. 0.1 – Etat des lieux de ce qui est connu actuellement concernant l'équivalence des critères de condensation de Bose-Einstein pour le gaz parfait de Bose dans une boîte cubique.

0.3 Résultats actuels et questions nouvelles

0.3.1 Les critères de condensation et la classification

Il est bien connu depuis 1925 [1] que pour un gaz parfait de bosons identiques de masse m dans une boîte cubique $\Lambda = L^3$ décrit par l'ensemble grand-canonique (V, T, μ) avec T la température et μ le potentiel chimique, il existe une densité critique de saturation du gaz thermique $\rho_c = \zeta(3/2)/\lambda_\beta^3$, où $\lambda_\beta = \hbar\sqrt{2\pi\beta/m}$ est la longueur thermique et $\beta = 1/k_B T$. L'hypothèse d'A.Einstein reprise en 1938 [4] par F.London suppose que pour une densité de particule ρ supérieure à la densité critique ρ_c , le surplus de particules $\rho - \rho_c$ se met dans l'état fondamental de mode $k = 0$. Ainsi on note que $\rho_{k=0} = \rho - \rho_c$ pour $\rho > \rho_c$. Cependant cet argument de population macroscopique de l'état fondamental dépend drastiquement de la géométrie de la boîte. C'est ce que H. B. G. Casimir a d'abord découvert en 1968 [C] pour une certaine géométrie anisotrope et ce qui a motivé les travaux de M.van den Berg, J.Lewis et J.Pulé à partir de 1981 [26]- [29].

Pour le gaz parfait, nous avons les résultats connus suivants :

- Le critère de Penrose et Onsager de corrélation à longue portée est actuellement considéré comme le critère de condensation de Bose-Einstein au sens d'Einstein et London, i.e. sur l'état fondamental uniquement [12], [9].
- Sütö en 1993 puis 2002 [13] a montré que la densité de cycles infinis est égale à la densité condensée dans le mode fondamental.

Cependant, il n'est pas du tout évident que le critère de Penrose et Onsager soit équivalent au concept de condensation généralisée. Par exemple si dans une boîte anisotrope de type Casimir, nous avons un condensat de type III, c'est à dire un condensat réparti sur une bande d'énergie dans laquelle chaque état possède un nombre mésoscopique de particules, le critère d'ODLRO est-il valide? De même, il n'est pas évident que la présence de longs cycles est équivalent au critère de condensation généralisé.

Ainsi, la première question soulevée dans cette thèse est la suivante : **Y a-t-il une équivalence entre des critères de condensation généralisée, cycles infinis et corrélations à longue portée ?**

Un autre problème se présente. Le critère de van den Berg, Lewis et Pulé permet d'établir une classification de condensats en trois types I, II et III. Il s'avère notamment que le type III peut-être intéressant pour les système bi-dimensionnels en présence d'interactions entre les particules car il est prouvé que dans le cas homogène il ne peut y avoir de condensation macroscopique sur le mode fondamental, d'après le théorème de Bogoliubov-Hohenberg [31], [32], et ni même sur un ensemble d'états macroscopiquement occupés [33], et il est donc envisagé de chercher à savoir si le condensat peut-être de type III, [33]. Cependant, la classification qui fait référence aux modes quantiques occupés peut-être un sérieux désavantage quand à

l'étude des cas en interactions pour lesquels la structure du spectre d'énergie n'est pas aussi évidente que pour le gaz parfait, ainsi si nous classifions les différents types de condensats via une hiérarchie de cycles longs, une analyse du cas en interaction pourrait s'envisager différemment. L'étude du condensat via les cycles est notamment envisagé pour le cas cubique tridimensionnel dans [34]. De plus d'un point de vue expérimental, il n'est pas toujours facile de mesurer la dispersion du spectre condensé (même si cela peut se faire [16]), il serait beaucoup plus fin et plus physique de calculer les propriétés de cohérence associées aux différents types.

La deuxième question qui se pose donc est la suivante : **Comment traduire la classification de van den Berg-Lewis-Pulé pour les critères de corrélation à longue portée et de cycles infinis ?**

Le but de cette partie traitée dans le chapitre 1 et dans [14] via une approche d'échelle est notamment de relier les différentes terminologies utilisées pour classifier les différents condensats : condensat de Bose-Einstein usuel (sur le mode fondamental), condensat fragmenté et quasi-condensat avec la classification de van den Berg, Lewis et Pulé.

0.3.2 La seconde transition

En ce qui concerne la seconde transition qui est l'objet d'étude fondamental de la thèse, plusieurs motivations me sont apparues :

- Les observations obtenues dans les expériences dans les milieux quasi-1D et quasi-2D [17], [16], ont montré des phénomènes analogues aux résultats théoriques pour le modèle du gaz parfait dans des boîtes exponentiellement anisotropes quasi-2D.

- Théoriquement même si la seconde densité critique a déjà été montrée [27], [28], [29], il reste des zones d'ombre quand à la nature de la transition et à son interprétation. De plus les fractions condensées, la seconde température critique, n'ont pas été calculées et les propriétés de cohérence n'ont pas été clairement élucidées. En effet, le modèle du gaz parfait devient une nouvelle prédiction théorique pour les gaz de Bose sans interaction ou en très faibles interactions. Il peut être aussi considéré comme un avertissement sur le rôle important de la géométrie sur le condensat que l'on peut mettre en compétition avec les effets des interactions.

- La seconde transition n'a jamais été étudiée pour un modèle de gaz parfait quasi-1D, ni en général pour un gaz quasi-1D ou quasi-2D dans un piège harmonique, système plus proche de la réalité expérimentale pour les condensats d'atomes froids.

- Des théories décrivent un type de "transition" similaire pour le gaz parfait à

nombre fini de particules [15], cependant la notion de transition en limite thermodynamique n'a pas été étudiée dans ce modèle. De plus l'interprétation en terme de condensat de type III et coexistence de deux types de condensat (I et III) avec des changements sur les propriétés d'échelles de la cohérence quantique n'ont pas été explorées. Notre modèle et notre approche donnent donc une interprétation claire et limpide de ce phénomène de seconde transition pour le gaz sans interaction. Pour le gaz en régime Thomas-Fermi [20] un phénomène analogue à la seconde transition a été prédite. Cependant notons que l'interprétation est radicalement différente puisque ce régime néglige la partie cinétique du condensat, ce qui est à l'opposé de notre modèle.

- La seconde transition dans la représentation des cycles à la Feynman n'a pas été étudiée. La motivation implicite de cette nouvelle étude est de comprendre d'une autre manière l'analogie qu'il existe entre les polymères et les cycles de bosons [35], [36], [37]. Nous allons donc chercher en utilisant l'approche d'échelle du chapitre 1 et [14] l'analogie avec les polymères décrit via l'approche d'échelle développée par P.-G de Gennes dans les années 1970 [38]. Puis nous allons discuter l'analogie possible de la seconde transition pour un gaz de polymères idéaux en solution, par exemple une solution mélangeant de l'eau avec de l'huile et du savon (molécule amphiphiles et hydrophobes) pour lequel des émulsions se forment, en regardant les similitudes formelles des descriptions. Notons que des expériences dès le début des années 1990 [39] se sont réalisées pour étudier une transition microémulsion/macroémulsion (gouttes macroscopique d'huile) dans ce type de solution donnée en exemple ci-dessus.

0.4 Résultats de la thèse

Nous donnons l'ensemble des résultats importants par chapitre.

0.4.1 Equivalence des critères et classification et méthode d'échelle, voir Chapitre 1 et [14]

Dans le chapitre 1, nous avons deux types de résultats intéressants :

(1) Le premier est l'équivalence pour le gaz parfait entre les trois critères de condensation (CBE généralisé, ODLRO et longs cycles).

(2) Le deuxième concerne l'établissement de classification pour les corrélations longue portée et les longs cycles via l'approche d'échelle et la relation entre les trois classifications pour le gaz parfait.

Plus précisément pour le premier type de résultat, les théorèmes 1.2 et 1.3, on montre que lorsque la densité de particules ρ dépasse la densité critique $\rho_c(\beta)$ on a :

Theorème 0.1 *Pour un gaz parfait de Bose grand-canonique (Λ, β, μ) avec les conditions périodiques, où $\beta = 1/k_B T$ (k_B est la constante de Boltzmann, T est*

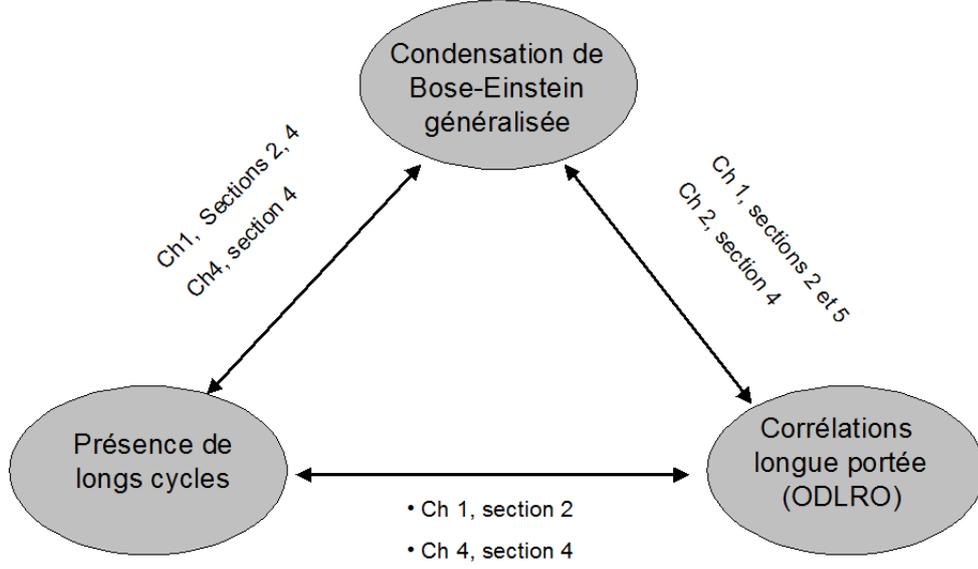


FIG. 0.2 – Etat des lieux des résultats prouvés dans cette thèse concernant l'équivalence des critères de condensation et des classifications des condensats, cycles et corrélations à longue portée.

la température) et μ est le potentiel chimique, dans des boîtes parallélépipédiques quelconques $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3 \subset \mathbb{R}^3$ de volume $|\Lambda| = V$, nous avons équivalence des trois critères de condensation :

$$\rho_0(\beta) = \sigma(\beta) = \rho_\infty(\beta) .$$

où $\sigma(\beta)$ sont les corrélations à longue portée (ODLRO [9]) (voir définition 1.3) , $\rho_\infty(\beta)$ est la densité de particule dans les cycles longs (voir définition 1.4) et $\rho_0(\beta)$ est la densité de particule dans la condensat généralisé (voir définition 1.1) :

$$\rho_0(\beta) = \begin{cases} 0 & , \rho < \rho_c(\beta) \\ \rho - \rho_c(\beta) & , \rho > \rho_c(\beta) \end{cases} ,$$

avec $\rho_c(\beta)$ la densité critique de particule (voir définition 1.9)

Pour le deuxième type de résultats nous avons deux résultats intéressants pour connaître les propriétés du gaz de Bose dans une boîte de Casimir $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$, avec $L_\nu = V^{\alpha_\nu}$, $\nu = 1, 2, 3$, et $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$ et d'établir des relations entre les différentes terminologies utilisées dans la littérature pour nommer les différents types de condensats.

Premièrement, le nombre de particules dans le CBE généralisé N_0 (supposons que le système est fini mais que $N \gg 1$) peut se décrypter en l'écrivant comme une somme :

$$N_0 = n_1 + n_2 + \dots + n_M,$$

où les n_i sont les nombres de particules dans les différents états condensés. Nous avons trois cas possibles :

(i) Si $M = 1$, on a seulement l'état fondamental qui contient un nombre de particules macroscopiques, alors on dit que le condensat est *usuel* ou *conventionnel* [18], [33], [40] et que le CBE généralisé est de type I. Dans ce cas là pour le gaz parfait dans une boîte de Casimir avec $\alpha_1 < 1/2$, le gaz de Bose contient des cycles macroscopiques et la longueur de cohérence du condensat est macroscopique dans les trois directions spatiales. La fonction de corrélation sur l'échelle de la boîte dans la direction d'anisotropie maximale est donnée par :

$$\lim_{V \uparrow \infty} \sigma_\Lambda(x - x') = \rho_0(\beta), \text{ for } \|x - x'\| = O(V^{\alpha_1}), \text{ si } \alpha_1 < 1/2,$$

(ii) si chaque état contient un nombre de particules macroscopique, notons $n_i = O(N)$, et que le nombre d'état $M > 1$ est de l'ordre de 1, notons $M = O(1)$, alors on dit que le condensat est *fragmenté* [18], [33], [40] ou que le CBE généralisé est de type I. Par contre si $M \gg 1$, on dit que le condensat est fragmenté mais que le CBE généralisé est de type II. Dans ce cas pour le gaz parfait dans une boîte de Casimir avec $\alpha_1 = 1/2$, le gaz de Bose contient des cycles macroscopiques et la longueur de cohérence du condensat est macroscopique dans les trois directions spatiales. La fonction de corrélation sur l'échelle de la boîte dans la direction d'anisotropie maximale est donnée par :

$$\sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^1} \frac{\cos(2\pi n y)}{\pi \lambda_\beta^2 n^2 + B}, \text{ pour } \|x - x'\| = yV^{\alpha_1}, \text{ si } \alpha_1 = 1/2,$$

(iii) si chaque état contient un nombre de particules mésoscopiques, notons $n_i = O(N^\delta)$, $0 < \delta < 1$, alors on dit que le condensat est un *quasi-condensat* [18], [33], [40] ou que le CBE généralisé est de type III. Dans ce cas-là pour le gaz parfait dans une boîte de Casimir avec $\alpha_1 > 1/2$, le gaz de Bose contient des cycles mésoscopiques et la longueur de cohérence du condensat est macroscopique dans les deux directions spatiales mais mésoscopiques dans la direction d'anisotropie maximale. La fonction de corrélation sur l'échelle de la boîte dans la direction d'anisotropie maximale est donnée par :

$$\rho_0(\beta) e^{-2y\sqrt{\pi C}/\lambda_\beta}, \text{ pour } \|x - x'\| = yV^{\delta/2}, \text{ si } \alpha_1 > 1/2,$$

Pour faire un contact avec l'expérience il faut adapter ces résultats pour un gaz d'atomes froids confinés dans un piège harmonique pour lequel la limite thermodynamique consiste à faire tendre les pulsations du piège vers zéro, avec des vitesses différentes du type Casimir pour construire l'anisotropie (ou modèle anisotropie exponentielle). Nous verrons ce qui se passe pour ce type de piège anisotrope pour le condensat généralisé et pour les longueurs de cohérence dans le chapitre 2 et 3.

0.4.2 Seconde transition dans le gaz de Bose dans une boîte quasi-bi-dimensionnelle, voir Chapitre 2 et [30]

Dans le chapitre 2 on considère un gaz parfait de Bose ou l'Hamiltonien à une particule dans une boîte $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ avec les conditions aux bords de Dirichlet est donné par :

$$T_\Lambda^{(N=1)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

dans des boîtes quasi-bi-dimensionnelles avec un modèle d'anisotropie exponentielle [27] $L_1 = L_2 = Le^{\alpha L}$, $L_3 = L$ avec le paramètre d'anisotropie $\alpha > 0$. Nous avons obtenu des résultats pour l'étude de la seconde transition :

(i) Dans la section 2.2 Pour un gaz parfait de Bose dans un modèle de boîte exponentiellement anisotrope, nous avons l'existence d'une seconde transition qui distingue deux régimes condensés différents : un quasi-condensat et une coexistence entre un quasi-condensat saturé et un condensat conventionnel. Cette seconde transition apparait pour une seconde densité critique $\rho_m(\beta) > \rho_c(\beta)$, donnée par (2.5) :

$$\rho_m(\beta) = \rho_c(\beta) + \frac{2\alpha}{\lambda_\beta^2}$$

cette seconde densité critique a été déjà calculée par M. van den Berg [27] (il avait pris $\beta = 1 = \hbar = m$), la différence provient de l'interprétation de coexistence de deux types de condensats au delà de cette transition ainsi que des calculs énoncés dans la suite et des échelles de localisations et de corrélations.

(ii) Dans la section 2.5 nous avons calculé la seconde température critique associée T_m est donnée par (2.20) :

$$\frac{T_c - T_m}{T_c} = g\left(\frac{\rho_\alpha}{\rho}\right),$$

où $\rho_\alpha := 8\alpha^3/\zeta(3/2)^2$ et $g(x)$ est une fonction algébrique explicite (méthode de Cardan) :

$$g(x) = 1 - (1/9)(\Gamma(x)^{1/3} + x^{2/3}\Gamma(x)^{-1/3} - x^{1/3})^2,$$

avec $\Gamma(x) = (27 - 2x + 3\sqrt{3}\sqrt{27 - 4x})/2$.

L'existence de la seconde densité/température critique modifie la fraction condensée usuelle puisque nous avons une répartition du condensat en deux parties, ces fractions condensées sont données par (2.22), (2.23), (2.24) :

Pour la fraction quasi-condensée nous obtenons la loi suivante :

$$\frac{\rho_{qbec}(\beta)}{\rho} = \begin{cases} 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, & T_m \leq T \leq T_c, \\ \frac{\sqrt{\tau}}{T_c^{3/2}} T, & T \leq T_m. \end{cases}$$

Concernant le condensat conventionnel, nous obtenons la relation suivante, différente de l'expression standard [11] :

$$\frac{\rho_{bec}(\beta)}{\rho} = \begin{cases} 0, & T_m \leq T \leq T_c, \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} (1 + \sqrt{\frac{\tau}{T}}), & T \leq T_m, \end{cases}$$

La densité totale condensée $\rho_0(\beta) := \rho_{qbec}(\beta) + \rho_{bec}(\beta)$, résultant de la *coexistence* des deux condensats, donne l'expression standard :

$$\frac{\rho_0(\beta)}{\rho} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}.$$

Voir la figure 2.8 comme illustration des relations (2.22), (2.23), (2.24).

(iii) Nous avons appliqué l'approche d'échelle développée dans le chapitre 1 à notre modèle pour calculer la localisation spatiale des condensats dans la section 2.6 du chapitre 2, c.f. équations (2.31), (2.31), et les fonctions de corrélations (2.38), (2.39) ainsi que les longueurs de cohérences, c.f. équations (3.35), (2.43).

$$\frac{L_{ch}(T)}{L} = \left(\frac{L_1}{L}\right)^{\gamma(T)},$$

avec la dépendance de l'exposant en température, voir figure 2.10 :

$$\begin{aligned} \gamma(T) &= \sqrt{\frac{T}{\tau}} \left(\left(\frac{T_c}{T}\right)^{3/2} - 1 \right), \quad T_m < T < T_c, \\ &= 1, \quad T \leq T_m. \end{aligned}$$

(iv) Un résultat important que nous avons formulé dans la section 2.7 est que tous les résultats que nous avons vus pour le gaz de Bose dans des boîtes quasi-2D s'appliquent d'un point de vue local pour un gaz parfait de Bose dans un piège harmonique dit "quasi-bi-dimensionnel" (quasi-2D) défini par le modèle d'anisotropie exponentielle $L_1 = L_2 = Le^{\alpha L}$, $L_3 = L$, où L_ν , $\nu = 1, 2, 3$ sont les longueurs de confinement.

(v) Nous avons revisité la seconde transition par le concept d'échelle introduit dans le chapitre 1, via la nouvelle définition de condensation dite localisée dans la section 2.3, définition 2.1 :

Définition 0.1 *Pour un gaz de Bose dans une boîte parallélépipédique Λ_L , avec une densité de particules fixes ρ , il existe un condensat localisé en impulsion à l'échelle $\eta(L)$ si*

$$\rho_{0,\eta}(\beta, \rho) := \lim_{a \rightarrow 0, b \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{a\eta(L) \leq \|k\| \leq b\eta(L)} \rho_L(k) > 0$$

Si pour une densité donnée ρ , le condensat généralisé s'obtient comme la somme de condensats localisés en impulsion à des échelles différentes $\eta_i(L)$, on dit que plusieurs condensats localisés coexistent :

$$\rho_0(\beta, \rho) = \sum_i \rho_{0, \eta_i}(\beta, \rho)$$

qui nous a permis d'énoncer le théorème 2.1 :

Theorème 0.2 *Pour un gaz parfait de Bose dans des boites parallélépipédiques exponentiellement anisotropes quasi-bi-dimensionnelles $\Lambda_L = Le^{\alpha L} \times Le^{\alpha L} \times L$, $\alpha > 0$, pour une densité de particules fixes $\rho > \rho_c(\beta)$, il existe :*

- pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$: un condensat (quasi-condensat ou généralisé de type III) localisé en impulsion à l'échelle $k_c(L) = \lambda_\beta^{-1} e^{-\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c)L/2}$
- pour $\rho > \rho_m(\beta)$: une coexistence entre deux condensats (quasi-condensat ou généralisé de type III, localisés en impulsion à l'échelle $k_m(L) = \lambda_\beta^{-1} e^{-\alpha L}$, plus un condensat usuel ou généralisé de type I sur le mode fondamental).

(vi) Au final en vertu de l'étude de la fonction de corrélation du gaz de Bose par la méthode d'échelle, nous avons ouvert dans la section 2.6 la discussion pour définir de la seconde transition que nous avons vue comme *une transition d'échelle*, notion différente d'une transition de phase, définition 2.2 :

Définition 0.2 *Un système bosonique présente une **transition de phase à l'échelle** ou **transition d'échelle**, si l'une des dérivées successives de l'exposant dans la loi d'échelle donnant l'expression du rayon de corrélation, fonction de paramètres thermodynamiques (densité, température), est discontinu en un point critique. On dit que la transition est d'ordre n si la dérivée $n^{\text{ième}}$ de l'exposant est discontinue.*

Ainsi, nous avons formulé un résultat à propos de la nature de la seconde transition dans le cas du gaz parfait de Bose dans des boîtes exponentiellement anisotropes, sous forme d'un théorème 2.2 :

Theorème 0.3 *Un gaz parfait de Bose dans des boites parallélépipédiques exponentiellement anisotropes quasi-bi-dimensionnelles $\Lambda_L = Le^{\alpha L} \times Le^{\alpha L} \times L$, $\alpha > 0$ présente une **transition de phase à l'échelle** ou **transition d'échelle** d'ordre 1 : on trouve l'expression du rayon de corrélation :*

$$r_c(L) = \lambda_\beta e^{\alpha \gamma(T, \rho) L}$$

où l'exposant $\gamma(T, \rho)$ est donné par :

$$\begin{aligned} \gamma(T, \rho) &= \frac{\lambda_\beta^2}{2\alpha} (\rho - \rho_c(\beta)), \quad \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta) \\ &= 1, \quad \rho > \rho_m(\beta) \end{aligned}$$

0.4.3 Seconde transition dans le gaz de Bose dans un piège quasi-uni-dimensionnel, voir Chapitre 3 et [30]

Dans le chapitre 3, on considère un gaz parfait de bosons dans un piège harmonique tri-dimensionnel caractérisé par les pulsations ω_x , ω_y , ω_z : où le potentiel extérieur est donné par :

$$V_{ext}(r) = \frac{1}{2}m\omega_x^2x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2z^2,$$

et l'hamiltonien pour une particule est donné par :

$$T_{\Lambda}^{(N=1)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{ext}(r).$$

Si le nombre total de particule dépasse la densité critique $\frac{\zeta(3)}{(\hbar\beta\omega_0)^3} = N_c$:

(i) Dans la section 3.2 en supposant que nous avons une très forte anisotropie $\omega_z \ll \omega_{\perp}$ avec la pulsation transverse $\omega_{\perp} = \omega_x = \omega_y$, et que nous sommes sous la condition (3.2) :

$$\hbar\omega_z \ll \Delta\mu \ll \hbar\omega_{\perp},$$

nous avons une bande d'énergie uni-dimensionnelle qui se trouve condensée (3.3) :

$$\begin{aligned} N_{Qbec} &\equiv \sum_{s=(0,0,s_z)} N_s \simeq \frac{1}{\hbar\beta\omega_z} \int_{\mathbb{R}^+} d\epsilon_z \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_z + \Delta\mu)} - 1} \\ &\simeq -\frac{1}{\hbar\beta\omega_z} \ln[\beta\Delta\mu] = N - N_c, \end{aligned}$$

avec chacun des modes mésoscopiquement occupés, i.e. avec un nombre de particules dans chaque mode de l'ordre de N^{δ} , $0 < \delta < 1$, on utilise la terminologie *quasi-condensat* pour désigner ce type de condensat. Ceci impose un comportement asymptotique du potentiel chimique, c.f. (3.4) :

$$\Delta\mu = \beta^{-1} e^{-\hbar\beta\omega_z(N-N_c)},$$

ce qui nous permet d'introduire un modèle d'anisotropie, c.f. (3.6) :

$$\omega_z = \omega_{\perp} e^{-\omega_c^2/\omega_{\perp}^2}.$$

D'où l'existence d'un second nombre critique de particule à partir duquel le quasi-condensat sature, c.f. équation (3.7) :

$$N_m = N_c + \frac{\omega_c^2}{\hbar\beta\omega_0^3}.$$

Nous avons montré que pour un nombre de particule au delà de cette valeur, il existe une coexistence entre le quasi-condensat saturé et un condensat usuel sur le mode fondamental.

(ii) Nous avons ensuite calculé dans la section 3.3 la seconde température critique (3.15), voir figure 3.3 :

$$\frac{T_c - T_m}{T_c} = f\left(\frac{N_{\omega_c}}{N}\right)$$

où $N_{\omega_c} = \frac{\omega_c^3 \zeta(3)^{1/2}}{\omega_0^3}$ satisfait l'équation $\frac{N_{\omega_c}}{N} = \frac{\tau^3}{T_c^3}$, et l'expression analytique de fonction f est :

$$f(x) = 1 - \Omega(x)^{1/3} + \frac{x^{2/3}}{3} \Omega(x)^{-1/3}$$

où $\Omega(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4}{27} x^2}\right)$.

Nous avons calculé les fractions condensées : la fraction quasi-condensée en fonction de la température est donnée par (3.12), voir figure 3.2 :

$$\frac{N_{Qbec}}{N} = \begin{cases} 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3, & T_m \leq T \leq T_c, \\ \frac{\tau^2}{T_c^3} T, & T \leq T_m. \end{cases}$$

Tandis que pour le condensat sur le mode fondamental la fraction condensée est donnée par (3.13), voir figure 3.2 :

$$\frac{N_{bec}}{N} = \begin{cases} 0, & T_m \leq T \leq T_c, \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \left(1 + \left(\frac{\tau}{T}\right)^2\right), & T \leq T_m, \end{cases}$$

Pour le condensat total résultant de la coexistence de deux condensats on a (3.14), voir figure 3.2 :

$$\frac{N_0}{N} = \frac{N_{Qbec}}{N} + \frac{N_{bec}}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}.$$

(iii) Ensuite dans la section (3.4) nous avons étudié la fonction de corrélation moyennée sur l'espace (3.19) pour calculer en régime non condensée (3.24) voir figure 3.4 et condensé (3.32) (voir figure 3.5) pour la partie quasi-condensée. Nous avons aussi utilisé l'approche d'échelle du chapitre 1 pour étudier les propriétés de cohérence du quasi-condensat, on a ainsi une longueur de cohérence (3.35), voir figure 3.7 :

$$\frac{L_c}{L_{\perp}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\perp}\beta\Delta\mu}} = \left(\frac{L_z}{L_{\perp}}\right)^{\gamma(T)},$$

avec comme exposant (3.36), voir figure 3.6 :

$$\begin{aligned} \gamma(T) &= \left(\frac{T}{\tau}\right)^2 \left(\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 - 1\right), \quad T_m < T < T_c, \\ &= 1, \quad T \leq T_m. \end{aligned}$$

0.4.4 Seconde transition pour le gaz de cycles et analogie avec les polymères, voir Chapitre 4 et [41]

Dans le chapitre 4, on considère un gaz parfait de Bose ou l'Hamiltonien à une particule dans une boîte $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ avec les conditions aux bords de Dirichlet est donné par :

$$T_\Lambda^{(N=1)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

dans des boîtes quasi-bi-dimensionnelle avec un modèle d'anisotropie exponentielle [27] $L_1 = L_2 = Le^{\alpha L}$, $L_3 = L$ avec le paramètre d'anisotropie $\alpha > 0$.

(i) Nous avons obtenu des résultats pour l'étude de la seconde transition dans l'image des cycles de bosons :

- Un régime de *cycles mésoscopiques* pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$
- Un régime de *coexistence* de *cycles macroscopiques* et de *cycles mésoscopiques* pour $\rho > \rho_m(\beta)$

La densité de particules dans les cycles longs se décompose ainsi en deux parties correspondant à chacune des deux hiérarchies, les cycles mésoscopiques et macroscopiques (4.6) :

$$\rho_{longs}(\beta, \rho) = \rho_{meso}(\beta, \rho) + \rho_{macro}(\beta, \rho), \quad \rho > \rho_c(\beta),$$

avec (4.7), (4.8), voir figure 4.1 :

$$\begin{aligned} \rho_{meso}(\beta, \rho) &= \rho - \rho_c(\beta), \quad \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta) \\ &= \rho_m(\beta) - \rho_c(\beta), \quad \rho > \rho_m(\beta) \\ \rho_{macro}(\beta, \rho) &= 0, \quad \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta) \\ &= \rho(\beta) - \rho_c(\beta), \quad \rho > \rho_m(\beta) \end{aligned}$$

En définitive, en limite thermodynamique, nous obtenons une décomposition de la fonction de corrélation en trois parties (4.9) :

$$\begin{aligned} \sigma(x, x') &= \sigma_{macro}(x, x') + \sigma_{meso}(x, x') + \sigma_{therm}(x, x') \\ &= \rho_{macro} + \rho_{meso} + \sum_{j=1}^{\infty} \rho(j) e^{-4\pi\|x-x'\|^2/j\lambda_\beta^2} \end{aligned}$$

(ii) Concernant l'analogie de conformation polymères/cycles de bosons via l'approche d'échelle, nous trouvons ces résultats :

Le rayon de corrélation correspondant aux cycles longs mésoscopiques qui nous donne une image de sa représentation spatiale : on peut voir ces polymères mésoscopiques comme des boucles (fermées) composées par un nombre $n(L)$ de monomères

bosoniques qui s'étendent sur un rayon de taille $r_c(L)$ défini comme le rayon de corrélation, où les monomères bosoniques sont séparés d'une distance moyenne λ_β correspondant aux fluctuations thermiques. Nous obtenons ainsi la relation d'échelle entre la taille du polymère bosonique et le nombre de monomères dans celui-ci (4.10), voir figure 4.2 :

$$r_c(L) = \lambda_\beta n(L)^{1/2}.$$

Cette représentation des cycles de bosons est analogue à la description des polymères classiques, et plus spécifiquement des chaînes idéales linéaires d'après l'approche d'échelle de P.-G de Gennes [38], où le polymère est représenté comme une chaîne de monomères d'étendue spatiale R défini par le rayon de corrélation de la chaîne relié au nombre de monomères dans cette chaîne N (séparée par une distance moyenne a) par la relation d'échelle (4.11), voir figure 4.3 :

$$R = aN^{1/2}.$$

(iii) Nous discutons ensuite une possible analogie entre le gaz de cycles de bosons et une solution de polymère avec pour exemple l'étude de la transition microémulsion/macroémulsion en supposant qu'en vertu des similitudes formelles pour décrire les deux systèmes, pour une solution aqueuse de molécules hydrophobes et amphiphiles dans une boîte exponentiellement quasi-2D, la seconde transition est susceptible de se produire pour cette solution. En d'autres termes, nous devrions observer une transition mésoémulsion/macroémulsion (gouttes d'huile macroscopiques) pour une concentration de molécules hydrophobes supérieure à une concentration critique à partir de laquelle est prédite [35] et observée [39] la saturation de microémulsions.

Chapitre 1

Le concept d'échelle pour l'étude de la condensation de Bose-Einstein généralisée

"The physical idea which plays a central role is that in a quantum-mechanics Bose liquid the atoms behave in some respects like free particles"

R. P. Feynman, Atomic Theory of the λ -Transition in Helium, The Physical Review **91**, 1291 (1953); [8].

Le but de ce chapitre est d'abord de prouver l'équivalence des critères de condensation : condensation généralisée, existence de cycles infinis et de corrélations à longue portée, ensuite il s'agira d'établir un lien entre les différentes classifications de ces critères via une approche d'échelle.

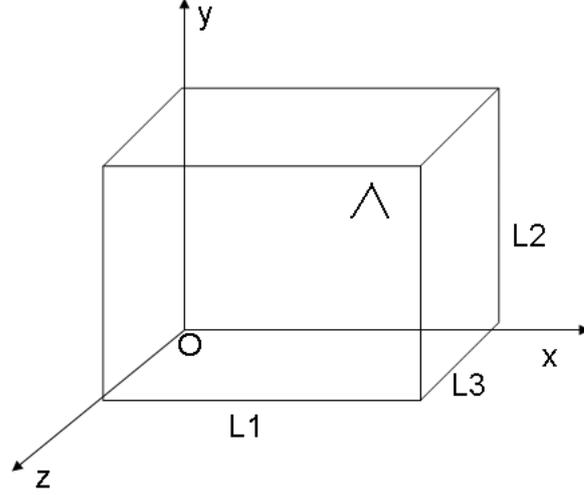
1.1 Condensation de Bose-Einstein dans des boîtes parallélépipédiques

Dans cette section nous allons faire une revue des différents concepts de condensation de Bose-Einstein (CBG) : CBE généralisée, cycles longs, corrélation à longue portée et montrer l'équivalence des différents critères de condensation pour le gaz parfait dans des boîtes.

1.1.1 A propos du concept de condensation de Bose-Einstein généralisé

Notions de bases

Considérons un gaz parfait de bosons dans l'ensemble grand canonique (Λ, β, μ) dans des boîtes parallélépipédiques $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3 \in \mathbb{R}^{d=3}$ avec L_1, L_2, L_3 quel-



conques qui peuvent être des fonctions les unes des autres, et ce choix de fonctions détermine le modèle d'anisotropie. Par exemple, on peut prendre le modèle anisotrope usuel pour lequel on prend $L_1 = \lambda L_3$, $L_3 = L_2$ si on veut une anisotropie dans une seule direction (modèle *allongé*). On peut aussi prendre le modèle d'*anisotropie algébrique*, plus connu sous le nom de modèle de *boîte de Casimir* [25] avec $L_1 = V^{\alpha_1}$, $L_2 = V^{\alpha_2}$, $L_3 = V^{\alpha_3}$, où $\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \alpha_3 > 0$ et où on impose $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$ de sorte à ce que le produit des trois longueurs donne le volume V . Pour ce modèle que nous allons choisir comme exemple pour illustrer ce premier chapitre, il existe trois classes d'anisotropies différentes distinguant trois régimes de condensation différents : $\alpha_1 < 1/2$, $\alpha_1 = 1/2$, $\alpha_1 > 1/2$. Et puis on peut avoir un modèle plus particulier d'*anisotropie exponentielle*, ou *boîte de van den Berg* avec $L_1 = L_2 = Le^{\alpha L_3}$ où $\alpha > 0$ est le paramètre d'anisotropie exponentielle. Nous verrons ce type d'anisotropie exponentielle dans les chapitre 2, 3 et 4.

Ecrivons maintenant l'hamiltonien libre pour une particule :

$$H_{\Lambda}^{(N=1)} = T_{\Lambda}^{(N=1)} := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta .$$

Pour les conditions aux bords périodiques on obtient alors l'espace des moments :

$$\Lambda^* = \left\{ k \in \mathbb{R}^3 : k = \left(\frac{2\pi n_1}{L_1}, \frac{2\pi n_2}{L_2}, \frac{2\pi n_3}{L_3} \right); n_\nu \in \mathbb{Z}^1 \right\}. \quad (1.1)$$

et les niveaux d'énergie (valeurs propres du Laplacien avec les conditions périodiques) sont pour $k \in \Lambda^*$:

$$\epsilon_\Lambda(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 . \quad (1.2)$$

Rappelons que dans l'ensemble grand canonique, la valeur moyenne de la densité de particules dans un mode k est donnée par la distribution de Bose-Einstein :

$$\rho_\Lambda(k) := \frac{1}{V} \langle N_\Lambda(k) \rangle(\beta, \mu) = \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k) - \mu)} - 1}, \quad (1.3)$$

où $\langle N_\Lambda(k) \rangle(\beta, \mu)$ représente la moyenne statistique de Gibbs pour l'opérateur nombre de particules $N_\Lambda(k)$ dans le mode k . La densité totale de particules est trivialement

$$\rho_\Lambda(\beta, \mu) := \sum_{k \in \Lambda^*} \rho_\Lambda(k). \quad (1.4)$$

Les fonctions d'ondes propres pour ce système $\Psi_{\Lambda,k}^{(N=1)}(x)$, $k \in \Lambda^*$ pour une particules libres dans la boîte sont :

$$\Psi_{\Lambda,k}^{(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik \cdot x} . \quad (1.5)$$

Condensation de Bose-Einstein dans une boîte cubique

Nous allons rappeler l'approche d'Einstein et London pour expliquer dans le cas d'une boîte cubique $\Lambda = L^3$ pourquoi nous avons un condensat sur le mode fondamental $k = 0$ à partir d'une certaine densité.

La densité critique $\rho_c(\beta)$ correspond à une densité de saturation de la partie thermique du gaz (dite *gaz thermique*), c'est à dire de la densité de particules réparties dans des états excités, en l'occurrence pour le cas d'une boîte cubique, dans les modes $\|k\| > 0$ différents du mode fondamental.

D'où vient cette saturation ?

Rappelons nous que la densité de particules dans les modes $\|k\| > 0$ différents du mode fondamental pour une température fixée $T > 0$ et un potentiel chimique fixé $\mu < 0$ est donnée en limite thermodynamique par :

$$\begin{aligned} \rho(\beta, \mu) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| > 0} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k) - \mu)} - 1} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m - \mu)} - 1} = \frac{g_{3/2}(e^{\beta\mu})}{\lambda_\beta^3}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

où $g_p(z) = \sum_{j=1}^{\infty} z^j / j^p$ et notons que $\mu < 0$ doit être strictement négatif car μ doit être strictement inférieur au niveau fondamental $\epsilon_\Lambda(k = 0) = 0$ pour assurer la

convergence de la densité, et donc nous avons une limite supérieure $\rho_c(\beta)$ pour la densité de particules dans les états excités :

$$\rho(\beta, \mu) < \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_\beta^3} \equiv \rho_c(\beta).$$

Que se passe-t-il si $\rho > \rho_c(\beta)$?

Einstein en 1925 a remarqué cette saturation du gaz thermique, et c'est à partir de ce constat qu'il émit l'hypothèse de condensation sur l'état fondamental. Voici dans son article [1] ce qu'il dit (version traduite [2]) :

"Que se passe-t-il alors si, sans changer la température, j'augmente la densité n/V [ici noté ρ] de la substance (par exemple en faisant une compression isotherme) ?

J'affirme que, dans ce cas, un nombre de molécules d'autant plus grand que la densité globale est plus élevée, passe dans l'état quantique 1 (état sans énergie cinétique), alors que les molécules restantes ont une distribution conformes à la valeur $\lambda = 1$ [$\lambda = e^A$ est l'activité notée ici $e^{\beta\mu}$] du paramètre λ . Cette affirmation revient donc à dire qu'il se produit quelque chose d'analogue à ce qui se passe lorsque l'on comprime de façon isotherme une vapeur au delà du volume de saturation. Il se produit une séparation : une partie «se condense», le reste demeure un «gaz parfait saturé» ($A = 0$ [ici $\beta\mu$], $\lambda = 1$)."

Cet argument heuristique n'a été expliqué rigoureusement que par F.London en 1938 [4]. Nous présentons ici dans un langage moderne son argumentation. En fait il faut considérer non pas que le potentiel chimique μ est fixé après la limite thermodynamique et que la densité de particules est solution de l'équation (1.6), mais plutôt l'inverse, c'est à dire que la densité de particules ρ est fixée et que le potentiel chimique est la solution, notée $\mu_\Lambda(\beta, \rho)$, de l'équation :

$$\rho = \rho_\Lambda(\beta, \mu) > \rho_c(\beta). \quad (1.7)$$

Cette solution existe et est unique car d'après (1.3) et (1.4), la fonction $\rho_\Lambda(\beta, \mu)$ est strictement monotone croissante pour l'argument μ . Dans ce cas, il faut résoudre cette équation pour trouver le comportement du potentiel chimique qui va tendre vers zero lorsque le volume V va tendre vers l'infini et qui dépendra de la température et de la densité. Si pour le cas du gaz dans une boîte cubique, on suppose que la solution $\mu_\Lambda(\beta, \rho)$ s'écrit asymptotiquement sous cette forme lorsque V tend vers l'infini :

$$\mu_\Lambda(\beta, \rho) = -\frac{A}{\beta V} + o\left(\frac{1}{V}\right), \quad A > 0, \quad (1.8)$$

alors on trouve que la densité de particules dans chaque mode différent du fondamental est nulle :

$$\rho(k) = \lim_{V \rightarrow \infty} \rho_\Lambda(k) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k) - \mu_\Lambda(\beta, \rho))} - 1} = 0,$$

car $\epsilon_\Lambda(k) \gg \mu_\Lambda(\beta, \rho)$, et dont la somme converge vers la densité critique :

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| > 0} \rho_\Lambda(k) = \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| > 0} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k) - \mu_\Lambda(\beta, \rho))} - 1} = \rho_c(\beta).$$

Ainsi la densité de particules dans le mode fondamental $k = 0$ notée ρ_0 doit valoir $\rho - \rho_c(\beta) > 0$ et nous obtenons l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \rho - \rho_c &= \rho(0) \equiv \lim_{V \rightarrow \infty} \rho_\Lambda(k = 0) \\ &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(-\mu_\Lambda(\beta, \rho))} - 1} \\ &= \frac{1}{A}, \end{aligned}$$

et donc nous avons trouvé l'expression de l'asymptotique du potentiel chimique solution pour l'équation (1.7) d'après la forme supposée (1.8) où A vaut $1/(\rho - \rho_c(\beta))$. Nous avons ainsi montré, pour le cas du gaz parfait dans une boîte cubique, grâce à une approche d'échelle pour la valeur du potentiel chimique, que le condensat qui existe au delà d'une densité critique est réparti sur le mode fondamental. C'est l'hypothèse de base retenu aujourd'hui pour définir un condensat et qui sert de base pour la théorie de la superfluidité de l'⁴He [?]. Cependant cet argument d'échelle dépend de la géométrie et rien ne peut assurer que le critère d'occupation macroscopique de l'état fondamental reste vrai pour les modèles d'anisotropie algébrique et exponentielle. En fait on peut définir un concept de condensation de manière plus général en limite thermodynamique.

Approche d'échelle de London généralisée

Pour convaincre le lecteur de la nécessité d'une telle généralisation, prenons l'exemple historique que H. B. G. Casimir étudia en 1968 [25]. Le modèle de boîte anisotrope dans une direction $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ avec $L_1 = V^{1/2}$ et $L_2 = L_3 = V^{1/4}$.

Dans ce cas, l'espace des moments donné par (1.1) devient :

$$\Lambda^* = \left\{ k \in \mathbb{R}^3 : k = \left(\frac{2\pi n_1}{V^{1/2}}, \frac{2\pi n_2}{V^{1/4}}, \frac{2\pi n_3}{V^{1/4}} \right); n_\nu \in \mathbb{Z}^1 \right\}.$$

et ainsi le niveau d'énergie (1.2) pour un $k \in \Lambda^*$ donné est donnée par :

$$\epsilon_\Lambda(k) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi n_1}{V} + \frac{2\pi n_2}{V^{1/2}} + \frac{2\pi n_3}{V^{1/2}} \right),$$

et donc si on suit le même type de raisonnement que pour la boîte cubique : la forme de la solution du potentiel chimique similairement à (1.8) s'écrit :

$$\mu_\Lambda(\beta, \rho) = -\frac{B}{\beta V} + o\left(\frac{1}{V}\right), \quad B > 0,$$

et pour tout mode $k \in \Lambda^*$ qui ne se trouve pas sur la direction de l'anisotropie maximale $k \neq (2\pi n_1/V^{1/2}, 0, 0)$, on a $\epsilon_\Lambda(k) \gg \mu_\Lambda(\beta, \mu)$ car les premières composantes k_2, k_3 de l'énergie sont de l'ordre de $1/V^{1/2}$ et donc très grande devant $1/V$ qui est de l'ordre de la vitesse de décroissance du potentiel chimique. Ainsi en sommant sur ces modes dit *exité* pour le calcul de la densité de particule, on trouve la densité critique :

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{k \neq (2\pi n_1/V^{1/2}, 0, 0)} \rho_\Lambda(k) = \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{k \neq (2\pi n_1/V^{1/2}, 0, 0)} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k) - \mu_\Lambda(\beta, \rho))} - 1} = \rho_c(\beta),$$

et une valeur de densité sur chaque mode en limite thermodynamique nulle. De plus, contrairement au cas cubique, pour les modes $k = (2\pi n_1/V^{1/2}, 0, 0)$, les niveaux d'énergies sont de l'ordre du potentiel chimique car $\epsilon_\Lambda(k = (2\pi n_1/V^{1/2}, 0, 0)) = (\hbar^2/2m)(2\pi)^2 n_1^2/V$, ainsi en sommant la densité sur ces modes qui doit être égale à $\rho - \rho_c(\beta)$, on trouve l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \rho - \rho_c &= \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{k=(2\pi n_1/V^{1/2}, 0, 0)} \rho_\Lambda(k) \\ &= \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{k=(2\pi n_1/V^{1/2}, 0, 0)} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta((\hbar^2/2m)(2\pi)^2 n_1^2/V + B/(BV))} - 1} \\ &= \sum_{n_1=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\beta((\hbar^2/2m)(2\pi)^2 n_1^2 + B)}, \end{aligned}$$

et donc on trouve B solution de cette dernière équation.

Cet exemple historique de 1968 nous montre un cas pour lequel le condensat est réparti sur un ensemble infini de modes distribués sur l'axe d'anisotropie maximale et dont chacun contient un nombre macroscopique de particules. Dans la classification que nous citerons dans la suite de van den Berg, Lewis et Pulé [28], on appelle ce condensat un condensat généralisé de type II. L'argument physique expliquant ce phénomène de distribution du condensat sur un ensemble de modes proches du fondamentale vient des lois d'anisotropies (lois d'échelles entre les différentes tailles selon les directions) de la boîte car elles ont un effet sur la distance entre deux modes sur les différentes directions. Ainsi lorsque dans une direction, par exemple x_1 les modes k_1 sont séparés d'une distance Δk_1 très petite par rapport aux distance Δk_2 et Δk_3 , le gap d'énergie fixé par l'expression asymptotique du potentiel chimique μ_Λ peut devenir plus grande que Δk_1 pour certaines anisotropies (comme dans cet exemple $\Delta k_1 = O(1/V)$ et $\mu_\Lambda = 0(1/V)$) et du coup répartir le condensat sur plusieurs niveaux d'énergie qui tendent vers zero avec une vitesse du même ordre voir plus petite (comme nous le verrons) que le potentiel chimique. C'est pour cette raison que van den Berg, Lewis et Pulé ont voulu généraliser la notion de condensat en tenant compte de toutes les possibilités, en calculant la densité de particules dans le mode fondamental en limite thermodynamique qui peut provenir d'un ensemble de modes qui tendent vers zero. C'est aussi ce qui a motivé le récent travail [14] de réécriture de cette notion de condensat généralisé basé sur cet argument de "bande

d'énergie proche de zero" et donc de somme sur les modes k inférieurs à une certaine échelle $\eta(V)$ qui tend vers zero lorsque V tend vers l'infini.

Condensation de Bose-Einstein généralisée

Voici la définition du condensat de Bose-Einstein généralisé [28], voir la figure 1.1 :

Définition 1.1 *Pour un gaz parfait de Bose grand-canonique (Λ, β, μ) dans une boîte parallélépipédique quelconque $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3 \subset \mathbb{R}^3$ de volume $|\Lambda| = V$, il existe un condensat de Bose-Einstein généralisé pour une densité fixe total de particules ρ , si nous avons :*

$$\rho_0(\beta, \rho) := \lim_{\epsilon \downarrow 0} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{\{k \in \Lambda^* : \|k\| \leq \epsilon\}} \rho_\Lambda(k) > 0 ,$$

où les densités de particules par modes $\rho_\Lambda(k)$ sont définit par (1.3) pour un potentiel chimique $\mu = \bar{\mu}_\Lambda(\beta, \rho)$.

Notons deux remarques importantes :

(i) On ne peut pas commuter les deux limites. En effet si on échange l'ordre des deux limites, on trouvera simplement la densité de particules dans le mode fondamental, ce qui est la définition d'un condensat à la Einstein et London.

(ii) La signification de cette seconde limite est simplement le calcul de la densité de particules dans l'ensemble des modes qui tendent vers 0 lorsque le volume V tend vers l'infini. Mais il est important de comprendre qu'il n'y a pas uniquement le fondamental qui est nul en limite thermodynamique, par exemple si on prend $k = (2\pi/L_1, 0, 0)$ qui n'est pas le mode fondamental $k = 0$, alors lorsque L_1 tend vers l'infini, le mode $k = (2\pi/L_1, 0, 0)$ tend vers 0, ainsi la densité de particules dans ce mode est comprise dans le calcul du condensat généralisé.

On a ainsi une classification naturelle de toutes les possibilités

Définition 1.2 • *Le condensat généralisé est :*

- de type I si on a un nombre fini d'états macroscopiquement occupé
- de type II si on a un nombre infini d'états macroscopiquement occupé
- de type III si aucun des états n'est macroscopiquement occupé bien que la densité de particules $\rho_0(\beta, \rho)$ dans le condensat généralisé est positive.

Pour le gaz parfait, on introduit la densité critique :

$$\rho_c(\beta) := \sup_{\mu < 0} \lim_{V \uparrow \infty} \rho_\Lambda(\beta, \mu) = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_\beta^3}, \quad (1.9)$$

où $g_s(z) := \sum_{j=1}^{\infty} z^j / j^s$ est reliée à la fonction zeta de Riemann $\zeta(s) := g_s(1)$. On note $\lambda_\beta = \hbar \sqrt{2\pi\beta/m}$ est la longueur thermique de de Broglie.

Notons que cette densité critique dite de saturation du gaz thermique, ne dépend pas de la géométrie (e.g. modèle Casimir ou exponentiel) car elle se calcule

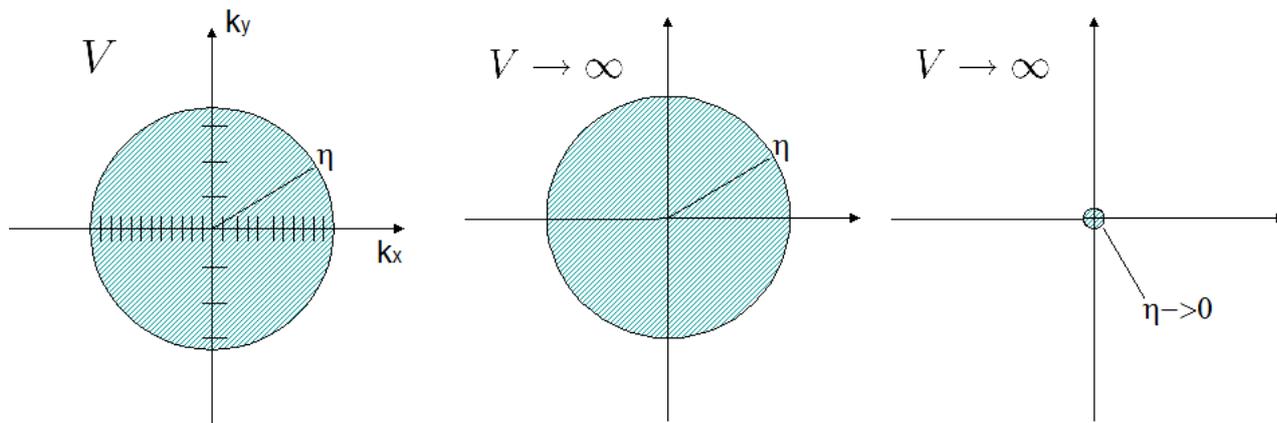


FIG. 1.1 – Shéma illustrant le processus d'obtention d'un condensat généralisé, voir définition 1.1

indépendamment des vitesses de décroissance $2\pi/L_\nu$, $\nu = 1, 2, 3$ des distances entre chaque modes dans chacune des trois directions. Cependant, comme nous le verrons dans le chapitre 2 et 3, il existe dans le cas d'anisotropie exponentielle une seconde densité critique noté $\rho_m(\beta)$ qui dépend de la géométrie et plus précisément du paramètre d'anisotropie exponentielle. Cette seconde densité critique sépare en fait deux régimes de condensation généralisé différents de type III (CBE réparti sur axes de moments) et de type I (CBE usuel sur le fondamental). Mais pour ce chapitre pour lequel l'exemple d'anisotropie est le modèle de Casimir, cette seconde densité est égale à la première $\rho_c(\beta)$ et donc la seconde transition n'intervient pas.

Nous allons montrer que pour un gaz parfait dans des boites quelconques, nous avons une condensation généralisée :

Theorème 1.1 *Soit un gaz parfait de Bose dans des boites parallélépipédiques quelconques $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$, nous avons :*

$$\begin{aligned} \rho_0(\beta, \rho) &= 0, \text{ si } \rho < \rho_c(\beta) , \\ &= \rho - \rho_c(\beta), \text{ si } \rho > \rho_c(\beta) , \end{aligned}$$

où $\rho_c(\beta)$ est la densité critique définie par (1.9).

Preuve :

D'après la définition 1.1, la densité non condensée est égale à :

$$\begin{aligned}
\rho - \rho_0(\beta, \rho) &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{\|k\| > \eta} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k) - \mu)} - 1} \\
&= \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{n_1, n_2, n_3: \|k\| > \eta} \frac{1}{L_1 L_2 L_3} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\nu=1}^3 \frac{\pi^2 n_\nu^2}{L_\nu^2} - \mu)} - 1} \\
&= \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{V \uparrow \infty} \int_\eta^\infty \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \mu)} - 1} \\
&= \sum_{j=1}^\infty \frac{e^{\beta\mu}}{\lambda_\beta^3 j^{3/2}} =: \frac{g_{3/2}(e^{\beta\mu})}{\lambda_\beta^3},
\end{aligned}$$

c.f. la définition de $g_s(z)$ et μ est la solution de $\rho = N_\Lambda(\beta, \rho)/V$. D'après (1.9), si $\rho < \rho_c(\beta)$ nous avons $\rho_0(\beta, \rho) = 0$ et si $\rho > \rho_c(\beta)$ nous avons $\rho_0(\beta, \rho) = \rho - \rho_c(\beta)$. \square

Pour illustrer la classification des condensations généralisés, voici les trois classes d'anisotropie pour le modèle de Casimir ($\alpha_1 < 1/2$, $= 1/2$, $> 1/2$) distinguant trois types de condensation généralisée, voir la figure 1.2. Cette proposition est montrée dans [26] et [28] :

Proposition 1.1 *Pour une densité de particules fixée $\rho < \rho_c(\beta)$ il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein généralisée pour le gaz parfait de Bose dans des boîtes de Casimir et le potentiel chimique est $\mu = \bar{\mu}(\beta, \rho)$ est l'unique solution de l'équation :*

$$\rho = g_{3/2}(e^{\beta\mu})/\lambda_\beta^3$$

Pour le cas $1/2 > \alpha_1$, pour une densité fixe $\rho > \rho_c(\beta)$ le potentiel chimique est $\bar{\mu}_\Lambda = -A/\beta V + o(1/V)$, avec $A > 0$ et il y a un condensat de Bose-Einstein généralisé de type I sur le mode $k = 0$. Nous obtenons A comme solution de l'équation :

$$\rho - \rho_c(\beta) = \frac{1}{A}. \quad (1.10)$$

Si $1/2 = \alpha_1$, alors le potentiel chimique est donné par $\bar{\mu}_\Lambda = -B/\beta V + o(1/V)$, avec $B > 0$ et nous obtenons un condensat de Bose-Einstein généralisé sur un ensemble infini de modes :

$$\begin{aligned}
\lim_{V \uparrow \infty} \rho_\Lambda(k) &= \frac{1}{B + \pi \lambda_\beta^2 n_1^2}, \text{ pour } k = (2\pi n_1/V^{\alpha_1}, 0, 0), \quad n_1 \in \mathbb{Z}^1, \\
&= 0, \text{ pour } k \neq (2\pi n_1/V^{\alpha_1}, 0, 0), \quad n_1 \in \mathbb{Z}^1.
\end{aligned}$$

Ici B est solution de :

$$\rho - \rho_c(\beta) = \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^1} \frac{1}{B + \pi \lambda_\beta^2 n_1^2}. \quad (1.11)$$

Si $1/2 < \alpha_1$, alors le potentiel chimique $\bar{\mu}_\Lambda = -C/\beta V^\delta + o(1/V^\delta)$, avec $\delta = 2(1 - \alpha_1)$ et $C > 0$. Le condensat de Bose-Einstein généralisé est de type III : pour tous les modes $k \in \Lambda^*$ nous avons $\lim_{V \uparrow \infty} \rho_\Lambda(k) = 0$, bien que $\rho_0(\beta, \rho) > 0$ et C solution de :

$$\rho - \rho_c(\beta) = \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda_\beta C^{1/2}}. \quad (1.12)$$

Pour démontrer ces résultats, il faut se reporter à la section 1.3 de ce chapitre. Par contre nous pouvons les expliquer succinctement. Nous avons dans la section précédente expliqué le cas cubique qui est un cas particulier du cas $\alpha_1 < 1/2$ et un cas particulier du cas $\alpha_1 = 1/2$ pour lequel nous avons pris $\alpha_2 = \alpha_3 = 1/4$. Il ne reste donc qu'à expliquer le cas $\alpha_1 > 1/2$. Prenons pour exemple $\alpha_1 = 3/4$ et $\alpha_2 = \alpha_3 = 1/8$. Dans ce cas, l'espace des moments donné par (1.1) devient :

$$\Lambda^* = \left\{ k \in \mathbb{R}^3 : k = \left(\frac{2\pi n_1}{V^{3/4}}, \frac{2\pi n_2}{V^{1/8}}, \frac{2\pi n_3}{V^{1/8}} \right); n_\nu \in \mathbb{Z}^1 \right\}.$$

et ainsi le niveau d'énergie (1.2) pour un $k \in \Lambda^*$ donné est donné par :

$$\epsilon_\Lambda(k) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi n_1}{V^{3/2}} + \frac{2\pi n_2}{V^{1/4}} + \frac{2\pi n_3}{V^{1/4}} \right).$$

Par contre si nous suivons le même type de raisonnement que pour la boîte cubique et que l'on suppose que la forme de la solution du potentiel chimique similairement à (1.8) s'écrirait :

$$\mu_\Lambda(\beta, \rho) = -\frac{C}{\beta V} + o\left(\frac{1}{V^{1/2}}\right), \quad C > 0,$$

alors dans ce cas comme la distance entre chaque modes $k_1 = (2\pi n_1/L_1, 0, 0)$ sur l'axe d'anisotropie maximal est de l'ordre de $1/V^{3/2}$, soit très inférieur à l'échelle de décroissance du potentiel chimique $1/V$, on aurait un nombre de modes condensé de l'ordre de $V^{1/2}$. Mais comme dans chacun de ces modes k_1 le nombre de particules d'après la distribution de Bose-Einstein serait alors de l'ordre de V (c'est à dire macroscopique), on aurait alors un nombre de particule condensé de l'ordre du produit du nombre de particules dans chaque états condensés multiplié par le nombre de ces états condensés soit de l'ordre de $V \times V^{1/2} = V^{3/2}$ et donc la densité de particules condensés divergerait en limite thermodynamique. Il faut donc chercher une autre asymptotique pour le potentiel chimique, supposons que :

$$\mu_\Lambda(\beta, \rho) = -\frac{C}{\beta V^{1/2}} + O\left(\frac{1}{V}\right), \quad C > 0.$$

Alors pour tout mode $k \in \Lambda^*$ qui ne se trouve pas sur la direction de l'anisotropie maximale $k \neq (2\pi n_1/V^{3/2}, 0, 0)$, on a $\epsilon_\Lambda(k) \gg \mu_\Lambda(\beta, \mu)$, car les premiers modes k_2 et k_3 ont des niveaux d'énergie de l'ordre de $1/V^{1/4} \ll 1/V^{1/2}$. Ainsi en sommant sur

ces modes dit *exités* pour le calcul de la densité de particules, on trouve la densité critique :

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{k \neq (2\pi n_1/V^{3/2}, 0, 0)} \rho_\Lambda(k) = \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{k \neq (2\pi n_1/V^{3/2}, 0, 0)} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k) - \mu_\Lambda(\beta, \rho))} - 1} = \rho_c(\beta),$$

et une valeur de densité sur chaque mode en limite thermodynamique nulle. Ainsi pour les modes $k = (2\pi n_1/V^{3/2}, 0, 0)$, les niveaux d'énergies sont plus petits que le potentiel chimique en ordre car $\epsilon_\Lambda(k = (2\pi n_1/V^{3/2}, 0, 0)) = (\hbar^2/2m)(2\pi)^2 n_1^2/V^{3/2}$, donc en sommant la densité sur ces modes qui doit être égale à $\rho - \rho_c(\beta)$, on trouve l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \rho - \rho_c &= \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{k=(2\pi n_1/V^{3/2}, 0, 0)} \rho_\Lambda(k) \\ &= \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{k=(2\pi n_1/V^{3/2}, 0, 0)} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta((\hbar^2/2m)(2\pi)^2 n_1^2/V^{3/2} + C/(\beta V^\delta))} - 1} \\ &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V^{1/2}} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-jC/V^{1/2}} \frac{1}{V^{1/2}} \sum_{n_1=-\infty}^{+\infty} e^{-(j/V^{1/2})\beta(\hbar^2/2m)(2\pi)^2 n_1^2/V}, \\ &= \int_0^{\infty} d\xi e^{-\xi C} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 e^{-\xi\beta(\hbar^2/2m)(2\pi)^2 k_1^2}, \end{aligned}$$

et donc on trouve C solution de cette dernière équation. Remarquons que dans ce calcul, nous avons écrit la limite des deux sommes de l'avant dernière ligne sous forme intégrale en posant $j/V^{1/2}$ et $n_1/V^{1/2}$ comme variable d'intégration lorsque V tend vers l'infini.

1.1.2 Fonction de corrélation et corrélations de longue portée

Il est bien connu depuis 1956 [9] que l'existence d'un ordre à longue portée (ODLRO), qui se produit lorsque la fonction de corrélation pour des points infiniment loin devient positive, est le critère de condensation de Bose-Einstein général car il est applicable au gaz en interaction. Cependant lorsque Penrose et Onsager écrivent le papier fondateur [9], notamment dans le but de montrer l'existence d'un condensat pour l'hélium superfluide et de comprendre leur relation, ne connaissaient pas le critère de condensation de Bose-Einstein généralisée pour le gaz parfait, et donc de la possibilité pour le condensat de se répartir sur un ensemble d'états pour des énergies contenues dans une certaine bande qui tend vers zero en limite thermodynamique.

Ainsi une question naturelle se pose : le critère de corrélation à longue portée de Penrose et Onsager est-il équivalent au critère de condensation généralisée ?

La réponse est presque évidente pour un condensat généralisé de type I ou II, mais qu'en est-il pour un condensat de type III ?

Nous allons montrer dans cette section que pour un gaz parfait de bosons dans une boîte quelconque le critère de condensation de Penrose et Onsager d'ordre à

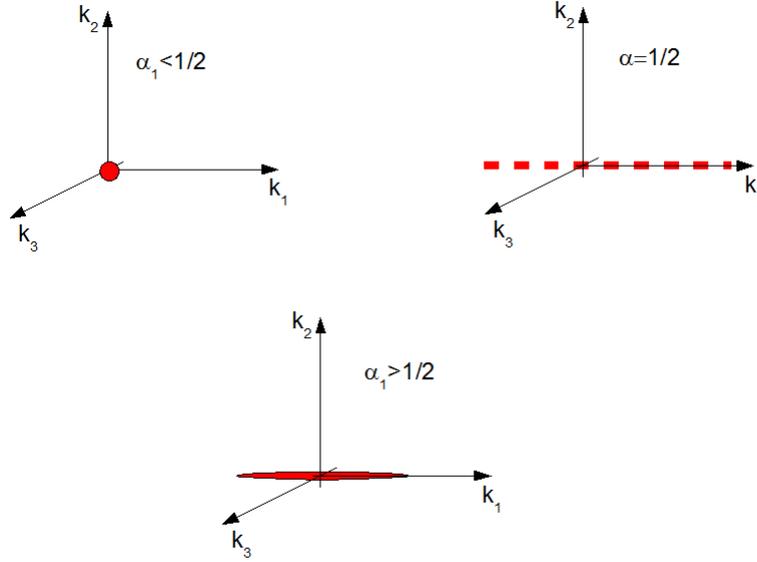


FIG. 1.2 – Figure illustrant les trois types de condensats dans des boites de Casimir, voir la proposition 1.1

longue portée est équivalent au critère de condensation de Bose-Einstein généralisée de van den Berg, Lewis et Pulé. Ce résultat a une grande importance car contrairement à l'énoncé historique du critère de Penrose et Onsager de condensation conventionnelle sur le mode fondamental, nous montrons que le paramètre d'ordre à longue portée peut impliquer l'existence d'un condensat de type III pour lequel aucun état n'est macroscopiquement occupé. Autrement dit, le critère de London d'occupation macroscopique de l'état fondamental n'est pas équivalent au critère de Penrose et Onsager [9].

Rappelons la définition formelle du paramètre d'ordre :

Définition 1.3 *Pour le gaz de Bose dans l'ensemble grand canonique, pour une densité de particules fixée ρ et une température fixée $T = 1/k_B\beta$, on dit que les corrélations sont à longue portée en limite thermodynamique si la partie hors diagonale de la fonction de corrélation pour deux points infiniment éloignés notée $\sigma(\beta, \rho)$ est positive :*

$$\sigma(\beta, \rho) := \lim_{\|x-x'\| \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \sigma_\Lambda(\beta, \rho; x, x') > 0 ,$$

où $\sigma(\beta, \rho; x, x') := \lim_{V \uparrow \infty} \sigma_\Lambda(\beta, \rho; x, x')$ est la fonction de corrélation entre deux points définie par :

$$\sigma_\Lambda(\beta, \rho; x, x') := \sum_{k \in \Lambda^*} \langle N_\Lambda(k) \rangle_\Lambda(\beta, \rho) \Psi_{\Lambda, k}^{(1)}(x) \Psi_{\Lambda, k}^{(1)}(x')^* = \sum_{k \in \Lambda^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot (x-x')} , \quad (1.13)$$

pour les conditions périodiques. La densité de particules $\rho_\Lambda(k)$ sur les modes k est définie par (1.3).

La quantité $\sigma(\beta, \rho)$ est considérée comme le paramètre d'ordre pour la condensation de Bose-Einstein. Il s'agit maintenant de montrer que pour le gaz parfait c'est le paramètre d'ordre pour la condensation généralisée, ce qui est énoncé dans le théorème qui suit :

Theorème 1.2 *Soit un gaz parfait de Bose grand-canonique (Λ, β, μ) dans une boîte parallélépipédique quelconque $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$, alors :*

$$\begin{aligned}\sigma(\beta, \rho) &= 0, & \text{pour } \rho < \rho_c, \\ &= \rho - \rho_c(\beta), & \text{pour } \rho > \rho_c,\end{aligned}$$

i.e. le critère de corrélations à longue portée est équivalent au critère de condensation de Bose-Einstein généralisée, pour le gaz parfait de Bose.

Preuve

Dans la preuve, on note le potentiel chimique après la limite thermodynamique $\bar{\mu}(\beta, \rho) := \lim_{V \uparrow \infty} \bar{\mu}_\Lambda(\beta, \rho)$.

Premièrement, nous séparons la fonction de corrélation en deux parties. La première est la corrélation pour le condensat et la seconde correspond à la partie non-condensée :

$$\begin{aligned}\sigma(\beta, \rho; x, x') &:= \lim_{\eta \downarrow 0} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{k \in \{\Lambda^* : \|k\| \leq \eta\}} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot (x-x')} \\ &+ \lim_{\eta \downarrow 0} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{k \in \{\Lambda^* : \|k\| > \eta\}} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot (x-x')} \quad (1.14)\end{aligned}$$

Deuxièmement, le premier terme du membre de droite de l'équation (1.14), correspondant à la partie condensée est égale à :

$$\lim_{\eta \downarrow 0} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{k \in \{\Lambda^* : \|k\| \leq \eta\}} \rho_\Lambda(k) \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{e^{ik \cdot (x-x')}}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m - \bar{\mu}(\beta, \rho))} - 1} = \rho_0(\beta, \rho)$$

car pour tout $k \in \Lambda^*$ tel que $\|k\| \leq \eta$, on a $k \cdot (x - x') \rightarrow 0$ quand $\eta \rightarrow 0$. Ce terme est donc égal à la densité de particules dans le condensat généralisé $\rho_0(\beta, \rho)$ d'après le théorème 1.1. Le second terme du membre de droite de l'équation (1.14), correspondant à la partie non-condensée est égale à :

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{e^{ik \cdot (x-x')}}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m - \bar{\mu}(\beta, \rho))} - 1},$$

car pour les mêmes raisons que la preuve du théorème 1.1, nous prenons la limite d'une somme de Darboux-Riemann. Nous obtenons ainsi :

$$\sigma(\beta, \rho; x, x') := \rho_0(\beta, \rho) + \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{e^{ik \cdot (x-x')}}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m - \bar{\mu}(\beta, \rho))} - 1}. \quad (1.15)$$

Troisièmement, nous calculons la valeur des corrélations à longue portée en prenant la limite $\|x - x'\| \rightarrow \infty$, ce qui donne pour la seconde partie de l'équation (1.16) :

$$\lim_{\|x-x'\| \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{e^{ik \cdot (x-x')}}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m - \bar{\mu}(\beta, \rho))} - 1} = 0 ,$$

en vertu du théorème de Riemann-Lebesgue. Etant donné que pour la première partie de l'équation (1.16), le résultat est le même, nous obtenons :

$$\lim_{\|x-x'\| \rightarrow \infty} \sigma(\beta, \rho; x, x') := \rho_0(\beta, \rho) . \quad (1.16)$$

Ainsi la valeur du critère de Penrose-Onsager pour un gaz parfait de Bose dans une boîte parallélépipédique est égale au critère de condensation de Bose-Einstein généralisée de van den Berg-Lewis-Pulé. \square

Heuristiquement nous pouvons expliquer ce résultat en prenant l'image suivante : d'après l'image de de Broglie, chaque particule quantique dans un mode k possède une longueur d'onde $\lambda = 1/k$ et qui pour les modes condensés tend vers l'infini en limite thermodynamique, ce qui assure la communication entre les particules dans le condensat. Ainsi peu importe le type de condensat (I,II ou III) nous obtenons une valeur pour corrélations entre deux points infiniment éloigné après la limite thermodynamique égales à la valeur du condensat.

Par contre si on regardait les corrélations entre deux points s'éloignant vers l'infini en même temps que l'on prend la limite thermodynamique et avec une certaine vitesse qui dépend de L_1, L_2, L_3 , alors le type de condensat pourra modifier les échelles de vitesses. En effet comme la longueur d'onde s'écrit $\lambda = 1/k$ pour particules quantiques condensées dans un mode k , si $\lambda \ll L_1$ alors l'échelle des corrélations sera plus petite que la taille L_1 de la boîte, ce qui se passe lorsque l'on a une boîte très allongée ou très aplatie, ce que nous verrons succinctement dans la section 1.4 de ce chapitre et dans le chapitre 2. Cette idée d'étude des corrélations pour une certaine échelle dépendante des tailles de la boîte motive la suite de ce chapitre et notamment la section 1.4 pour les corrélations.

1.1.3 Approche de Feynman et existence des cycles longs

Concept de cycles de Feynman

Rappelons succinctement la notion du gaz de polymères de Bose par réécriture de la fonction de partition. Soit N bosons dans une boîte parallélépipédique $\Lambda \in \mathbb{R}^3$. D'après le principe d'indiscernabilité bosonique, l'espace des états pour N bosons sont l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_{\Lambda, N}$ qui est la projection sur les fonctions symétriques de l'espace de Hilbert $L^2(\Lambda^N)$ des fonction de carré sommable sur Λ^N [12], [42] :

$$\Psi(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}) = P_N \Phi((x^{(1)}, \dots, x^{(N)})) , \quad (1.17)$$

où $\Phi \in L^2(\Lambda^N)$ et $\Psi \in \mathcal{H}_{\Lambda,N}$ et où P_N est le projecteur symétrique :

$$P_N \Phi(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}) := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \Psi(x^{\pi(1)}, \dots, x^{\pi(N)}) ,$$

où S_N est le groupe des permutations de N éléments.

Ainsi la fonction de partition canonique est égale à la trace de l'opérateur de Gibbs $e^{-\beta H_\Lambda^{(N)}}$ sur l'espace des fonctions symétrisé $\mathcal{H}_{\Lambda,N}$, où $H_\Lambda^{(N)}$ est un Hamiltonien pour N particules et $\beta = 1/k_B T$ est l'inverse de la température :

$$Z_\Lambda^N(\beta) = \text{Tr}_{\mathcal{H}_{\Lambda,N}} \left(e^{-\beta H_\Lambda^{(N)}} \right) \quad (1.18)$$

Soit un gaz parfait de bosons de masse m , dans une boîte parallélépipédique $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ de volume V , décrit dans l'ensemble grand-canonique (Λ, β, μ) , où $\beta = 1/k_B T$ avec k_B la constante de Boltzmann, T la température et μ le potentiel chimique, l'hamiltonien quantique pour une particule est $H_\Lambda^{N=1} = -\hbar^2 \Delta / 2m$ avec les conditions périodiques. Les fonctions d'ondes pour une particule associées aux modes $k = (2\pi n_1/L_1, 2\pi n_2/L_2, 2\pi n_3/L_3)$, $n_\nu \in \mathbb{Z}$ sont données par $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikx}$ et les énergies par $\epsilon_\Lambda(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$. Ainsi d'après (1.17), associées à un ensemble de modes $\tilde{k} = (k^{(1)}, \dots, k^{(N)})$ sont données par la symétrisation du produit des fonctions d'ondes associées à chaque modes dans l'ensemble :

$$\Psi_{\tilde{k}}(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}) = C_{\tilde{k}} \sum_{\pi \in S_N} \prod_{i=1}^N \psi_{k^{(i)}}(x^{\pi(i)}) . \quad (1.19)$$

où $C_{\tilde{k}} = \sqrt{1/(N! \prod_k N_k!)}$ est le coefficient de normalisation.

Ainsi on peut écrire la fonction de partition canonique en tenant compte de (1.18) et de (1.19) :

$$\begin{aligned} Z_\Lambda^N(\beta) &= \\ &= \sum_{\tilde{k}} \int_{\Lambda} \dots \int_{\Lambda} dx^{(1)} \dots dx^{(N)} \Psi_{\tilde{k}}^*(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}) e^{-\beta H_\Lambda^N} \Psi_{\tilde{k}}(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}) \\ &= \sum_{\pi} \sum_{k^{(1)}, \dots, k^{(N)}} C_{\tilde{k}}^2 \int_{\Lambda} \dots \int_{\Lambda} dx^{(1)} \dots dx^{(N)} \prod_{i=1}^N e^{-\beta \epsilon_{k^{(i)}}} \psi_{k^{(i)}}(x^{\pi(i)}) \psi_{k^{(i)}}(x^{(i)}) \end{aligned}$$

On peut décomposer le groupe S_N en classes d'équivalences C dans laquelle chaque permutation se décompose en produit de permutations cycliques (dit *cycles*) indépendantes.

Par exemple soit quatre objets 1, 2, 3, 4, on a cinq classes d'équivalences, voir figure 1.3 :

- (1)(2)(3)(4) (4 cycles de longueur 1),
- (12)(3)(4) (1 cycle de longueur 2 et 2 cycles de longueur 1),
- (12)(34) (2 cycles de longueur 2),

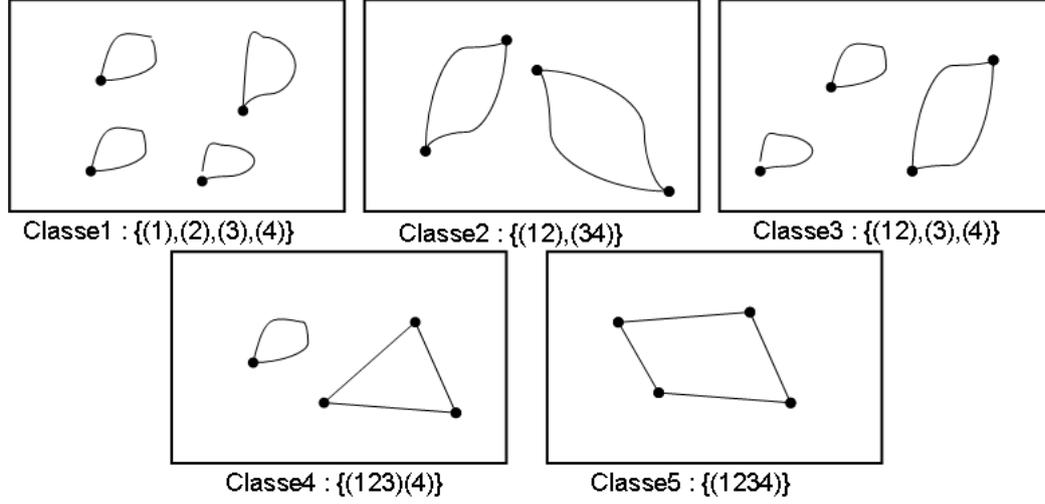


FIG. 1.3 – Figure illustrant les différentes classes de permutations du groupe S_4

(123)(4) (1 cycle de longueur 3 et 1 cycle de longueur 1),

(1234) (1 cycle de longueur 4).

Chaque classes d'équivalence $C_{\{n_j\}}$ du groupe S_N possède un nombre de permutations équivalentes $|C_{\{n_j\}}| = \frac{N!}{\prod_{j=1}^N (n_j! j^{n_j})}$, où n_j est le nombre de cycles de longueur j dans chaque permutation de la classe.

Par exemple pour la fonction de partition à 4 particules on a :

$$Z_{\Lambda}^4(\beta) = \sum_{\{n_j\}_{j=1}^4: \sum_j j n_j = 4} Z_{\Lambda}^{C_{\{n_j\}}}(\beta)$$

où $Z_{\Lambda}^{C_{\{n_j\}}}(\beta)$ représente la fonction de partition pour la classe $C_{\{n_j\}}$, c'est à dire pour une configuration donnée comme par exemple la configuration 1 cycle de longueur 2 et 2 cycles de longueur 1 pour la classe $C_{2,1} = (12)(3)(4)$:

$$Z_{\Lambda}^{C_{2,1}}(\beta) := |C_{\{n_j\}}| \sum_{k^{(1)}, \dots, k^{(4)}} C_k^2 \int_{\Lambda} \dots \int_{\Lambda} dx^{(1)} \dots dx^{(4)} e^{-\beta \epsilon_{\Lambda}(k^{(1)})} \psi_{k^{(1)}}(x^{(2)}) \psi_{k^{(1)}}(x^{(1)}) \\ \times e^{-\beta \epsilon_{\Lambda}(k^{(2)})} \psi_{k^{(2)}}(x^{(2)}) \psi_{k^{(2)}}(x^{(1)}) e^{-\beta \epsilon_{\Lambda}(k^{(3)})} \psi_{k^{(3)}}(x^{(3)}) \psi_{k^{(3)}}(x^{(3)}) e^{-\beta \epsilon_{\Lambda}(k^{(4)})} \psi_{k^{(4)}}(x^{(4)}) \psi_{k^{(4)}}(x^{(4)}) ,$$

où $C_k^2 = 1/(4! \prod_k N_k!)$. Comme les fonctions d'ondes sont orthonormées et que l'on somme sur tous les modes, on trouve :

$$Z_{\Lambda}^{C_{2,1}}(\beta) := \left(\frac{1}{2} \sum_k e^{-2\beta \epsilon_{\Lambda}(k)} \right) \frac{1}{2} \left(\sum_k e^{-\beta \epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^2$$

avec $|C_{2,1}| = 4!/(2!2)$. En appliquant la même méthode pour les autres classes de C_4 , on arrive à l'expression suivante de la fonction de partition :

$$\begin{aligned} Z_{\Lambda}^4(\beta) &= \frac{1}{4} \left(\sum_k e^{-\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^4 + \left(\frac{1}{2} \sum_k e^{-2\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right) \frac{1}{2} \left(\sum_k e^{-\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^2 \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} \sum_k e^{-2\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^2 + \left(\frac{1}{3} \sum_k e^{-3\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right) \frac{1}{3} \left(\sum_k e^{-\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^3 + \left(\frac{1}{4} \sum_k e^{-4\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^4 \end{aligned}$$

En généralisant ce raisonnement au groupe S_N , nous pouvons récrire la fonction de partition canonique en faisant apparaître les cycles de permutations [14], [12], [13], [42], [43] :

$$Z_{\Lambda}^N(\beta) = \sum_{\{n_j\}_1^N, \sum_j j n_j = N} \prod_{j=1}^N \frac{1}{n_j!} \left(\frac{1}{j} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^{n_j}.$$

Ainsi nous avons réécrit la fonction de partition canonique en faisant apparaître de nouveaux objets grâce aux cycles de permutation : des "polymères de bosons" ou "cycles de Feynman" de taille j (nombre de bosons) et d'énergie $j\epsilon_{\Lambda}(k) = \hbar^2 \frac{(jk)^2}{2jm}$, ce que l'on peut interpréter comme un *polymère de bosons* avec une impulsion jk et une masse jm . Par *polymères* j'entends la notion abstraite de chaînes fermées de bosons dans l'espace des trajectoires de Wiener [43]. Bien entendu, cette notion de cycles n'est pas identique à celle de polymères classiques au sens de de Gennes [38] cependant il existe des points de comparaisons [43] et d'analogies [35] entre les deux notions, nous y reviendrons plus tard dans le chapitre 4.

On écrit maintenant la fonction de partition grand-canonique [14], [12], [13], [42], [43] :

$$\begin{aligned} \Xi_{\Lambda}(\beta, \mu) &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} Z_{\Lambda}^N(\beta) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \sum_{\{n_j\}_1^N, \sum_j j n_j = N} \prod_{j=1}^N \frac{1}{n_j!} \left(\frac{1}{j} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^{n_j} \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_j\}_1^N, \sum_j j n_j = N} \prod_{j=1}^N \frac{1}{n_j!} \left(\frac{e^{j\beta\mu}}{j} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^{n_j} \\ &= \prod_{j=1}^{\infty} \sum_{n_j=0}^{\infty} \frac{1}{n_j!} \left(\frac{e^{j\beta\mu}}{j} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right)^{n_j} \\ &= \prod_{j=1}^{\infty} \exp \left(\frac{1}{j} e^{j\beta\mu} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right), \end{aligned}$$

ce qui nous donne une notion de densité de particules dans un polymère de taille

j [14], [12], [13], [42], [43] :

$$\rho_{\Lambda,j}(\beta, \mu) = \frac{1}{V} e^{j\beta\mu} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)}, \quad (1.20)$$

avec la densité totale de particule égale à la somme sur toute les longueur de polymères :

$$\rho_{\Lambda}(\beta, \mu) = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_{\Lambda,j}(\beta, \mu). \quad (1.21)$$

Cette réécriture de la fonction de partition intrigait R.Feynman [8] en 1953 pour le gaz d'hélium 4. Mais les théoriciens devaient porter une grande attention au fortes interactions présentes entre les atomes d'hélium dans le gaz notamment à cause de la forte densité de particules de l'ordre de 10^{23} atomes par m^3 ! (ce qui est très grand par rapport au gaz d'atomes froids dilué de l'ordre de 10^{15} atomes par m^3). Feynman comptait discuter le lien entre la condensation de Bose-Einstein et la transition lambda de l'hélium avec quelques approximations justifiées intuitivement par cette nouvelle vision en terme de cycles de bosons et donc de gaz de cycles de bosons. Ce lien condensation/superfluidité est très difficile dans un régime d'interactions fortes entre particules, d'où la nécessité d'introduire des approximation et d'introduire de nouveaux concepts d'analyse de la fonction de partition. Avec ces nouvelles approches, l'idée formulée par R. Feynman est l'équivalence entre la condensation de Bose-Einstein et la formation de cycles infinis de bosons en limite thermodynamique. Le critère de condensation appelé ODLRO, ou corrélation à longue portée, de Penrose et Onsager de 1956 [9], s'est avéré en fait plus juste et valable pour les cas en interaction. Notons à ce propos que D. Ueltschi en 2006 [12] a proposé un phénomène de transition cycles finis/infinis sans existence d'ODLRO. A.Sütö en 1993 puis en 2002 [13] revint au cas du gaz parfait pour discuter la validité du critère d'existence de cycles infinis dans ce cas et montra sa validité pour le cas isotrope ($\Lambda = L^3$), d'après (1.20) :

$$\begin{aligned} \rho_{court}(\beta, \mu) &= \lim_{M \uparrow \infty} \lim_{L \uparrow \infty} \sum_{j=1}^M \frac{1}{V} e^{j\beta\mu} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \\ &= \frac{g_{3/2}(e^{\beta\mu})}{\lambda(\beta)^3} < \frac{\zeta(3/2)}{\lambda(\beta)^3} \equiv \rho_c(\beta). \end{aligned} \quad (1.22)$$

Notons les deux terminologies utilisées : *cycles infinis* et *cycles longs*. Il s'avère que la différence entre les deux est subtile et ne se voit pas au premier abord. Dans cette thèse et dans l'article [14], j'utilise la seconde terminologie parce que j'emploie dans la suite du chapitre (sections 1.3) l'approche d'échelle pour calculer la taille des cycles qui apparaissent lorsque l'on a existence d'un condensat généralisé. D'où l'adjectif "long" qui me paraît plus adapté que l'adjectif "infini" utilisé dans le cas où la densité de particules dans les cycles dit infinis se calcul comme la différence entre la densité et la densité de *cycles courts* qui sont de taille fini, voir (1.21) et

(1.22). Cette différence est la même que celle que nous allons voir dans ce chapitre entre la condensation généralisée et la condensation à l'échelle ou entre l'ordre à longue portée et l'échelle de longue portée, c'est d'ailleurs tout l'objet de concept utilisé dans cette thèse et notamment étudié dans ce chapitre.

Condensation généralisée versus cycles longs (infinis) et cycles courts

Dans le cas général, c'est à dire pour un gaz de Bose dans une boîte quelconque, nous allons montrer que le critère de Feynman (présence de cycles longs ou infini), démontré pour le gaz parfait dans une boîte cubique, est équivalent au critère de van den Berg, Lewis et Pulé (existence d'un condensat généralisé). Ce qui signifie dans ce cas que la présence de cycles longs n'est pas équivalent à l'existence d'un condensat sur l'état fondamental, notamment lorsque nous avons un CBE généralisé de type III. L'interprétation de ce résultat et son décodage se fera dans la suite par l'approche d'échelle appliquée au cycles.

Commençons par définir les notions de cycles courts et cycles longs

Définition 1.4 *On dit que la représentation (1.20) pour un gaz parfait de Bose grand-canonique contient uniquement des cycles courts si :*

$$\rho_{\text{court}}(\beta, \mu) := \lim_{M \rightarrow \infty} \left\{ \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{j=1}^M \rho_{\Lambda, j}(\beta, \mu) \right\} = \rho(\beta, \mu) := \lim_{V \uparrow \infty} \rho_{\Lambda}(\beta, \mu) , \quad (1.23)$$

c'est à dire qu'elle coïncide avec la densité de particules totale. Comme en général les limites de (1.23) ne sont pas interchangeable, nous disons que, pour une densité de particules totales donnée ρ la représentation (1.20) contient nombre macroscopique de particules dans les cycles longs, si $\rho > \rho_{\text{short}}(\beta, \bar{\mu}(\beta, \rho))$, ou encore si :

$$\rho_{\text{long}}(\beta, \rho) := \lim_{M \rightarrow \infty} \left\{ \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{j=M+1}^{\infty} \rho_{\Lambda, j}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)) \right\} > 0 , \quad (1.24)$$

avec $\bar{\mu}(\beta, \rho) := \lim_{\Lambda} \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)$, où $\bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)$ est l'unique solution de l'équation $\rho = \rho_{\Lambda}(\beta, \mu)$.

Nous allons maintenant montrer que l'existence de cycles longs (infinis) est équivalent dans le cas d'une boîte quelconque à l'existence d'un condensat généralisé :

Theorème 1.3 *Soit un gaz parfait de Bose dans des boites parallélépipédiques quelconques $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$, nous avons :*

$$\begin{aligned} \rho_{\text{long}}(\beta, \rho) &= 0, \text{ if } \rho < \rho_c(\beta) , \\ &= \rho - \rho_c(\beta), \text{ if } \rho > \rho_c(\beta) , \end{aligned}$$

où $\rho_c(\beta)$ est la densité critique défini par (1.9).

Preuve : Soit un gaz parfait de Bose grand-canonique, pour une densité ρ fixée, on pose $\bar{\mu}(\beta, \rho) := \lim_{\Lambda} \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)$, où $\bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)$ est l'unique solution de l'équation $\rho = \rho_{\Lambda}(\beta, \mu)$. En vetu des équations (1.20) et de (1.23), nous avons :

$$\begin{aligned} \rho_{\text{short}}(\beta, \bar{\mu}(\beta, \rho)) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left\{ \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{j=1}^M e^{j\beta \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)} \prod_{\nu=1}^3 \frac{1}{V^{\alpha_{\nu}}} \sum_{n_{\nu} \in \mathbb{Z}^1} e^{-j\beta \pi \lambda_{\beta}^2 (n_{\nu}/L_{\nu})^2} \right\} \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta \bar{\mu}(\beta, \rho)} \prod_{\nu=1}^3 \int_{\mathbb{R}} d\xi_{\nu} e^{-j\beta \pi \lambda_{\beta}^2 \xi_{\nu}^2} \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{j\beta \bar{\mu}(\beta, \rho)}}{\lambda_{\beta}^3 j^{3/2}} =: \frac{g_{3/2}(e^{\beta \bar{\mu}(\beta, \rho)})}{\lambda_{\beta}^3}, \end{aligned}$$

c.f. la définition de $g_s(z)$. D'après le théorème 1.1, si $\rho < \rho_c(\beta)$ nous avons donc $\rho_{\text{short}}(\beta, \bar{\mu}(\beta, \rho)) = \rho$ et si $\rho > \rho_c(\beta)$ nous avons $\rho_{\text{short}}(\beta, \bar{\mu}(\beta, \rho)) = \rho_c(\beta)$. Donc d'après définition 1.4 on conclut la preuve. \square

Intuitivement on considère que les cycles longs qui apparaissent lorsque l'on a un condensat usuel sont macroscopiques, c'est à dire de l'ordre du nombre de particules dans le gaz. Mais nous venons de montrer que les cycles longs peuvent apparaître lorsque l'on a un CBE généralisé et donc qui peut être de type III, c'est à dire réparti sur un ensemble de modes mésoscopiquement occupés. Dans ce cas, quelle est la taille des cycles longs ? Est-elle toujours macroscopique ou peut-elle être mésoscopique ? C'est pour ce problème que nous allons introduire une méthode d'échelle.

1.2 Condensation de Bose-Einstein généralisée re-visitée

Dans cette section nous proposons une modification du concept de condensation généralisée appelée condensation à l'échelle. Le but de cette notion est de présenter la condensation généralisée via l'idée que le condensat est réparti dans une bande d'énergie d'une certaine taille qui peut s'écrire avec une loi d'échelle en fonction des tailles géométriques L_1, L_2, L_3 . Ainsi cela permet de rentrer plus en détails dans la structure fine du paramètre d'ordre de CBE généralisé.

Il faut rappeler que le condensat généralisé est défini à partir de deux limites : d'abord la limite thermodynamique et ensuite la limite qui consiste à capter le mode fondamental contenant un *ensemble de modes* qui tendent vers zero lorsque le volume tend vers l'infini (on peut dire que ces modes sont *asymptotiquement nuls*). Voici la formule :

$$\rho_0(\beta, \rho) := \lim_{\epsilon \downarrow 0} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{\{k \in \Lambda^* : \|k\| \leq \epsilon\}} \rho_{\Lambda}(k) > 0 .$$

Mais que savons nous sur l'*ensemble de modes asymptotiquement nul* ? Comment pouvons nous décoder de manière plus fine la structure de ce condensat généralisé ?

C'est ainsi que nous proposons la définition suivante pour la notion de condensation à l'échelle, voir la figure 1.4 :

Définition 1.5 *Pour une densité de particules fixe ρ et un gaz parfait de Bose dans une boîte parallélépipédique Λ , il existe un condensat de Bose-Einstein à l'échelle $\eta(V)$ où $\eta : V \mapsto \mathbb{R}_+$ est une fonction positive et décroissante de sorte que $\lim_{V \uparrow \infty} \eta(V) = 0$, si :*

$$\rho_\eta(\beta, \rho) := \liminf_{V \uparrow \infty} \sum_{\{k \in \Lambda^* : \|k\| \leq \eta(V)\}} \rho_\Lambda(k) > 0 . \quad (1.25)$$

Bien sûr les deux définitions 1.1 et 1.5 ne sont pas équivalentes car la valeur du condensat à l'échelle dépend justement de l'échelle choisie pour la fonction η . En effet il se peut que pour un certain choix de fonction, le condensat à l'échelle soit nul alors que le condensat généralisé est non nul. Le lemme suivant donne de manière générale la hiérarchie entre les deux valeurs de condensat :

Lemme 1.1 *Pour toute fonction $\eta(V)$ nous avons :*

$$0 \leq \rho_\eta(\beta, \rho) \leq \rho_0(\beta, \rho) . \quad (1.26)$$

Il vient alors l'assertion logique suivante : l'existence d'un condensat à l'échelle implique l'existence d'un condensat généralisé (et par contraposition l'absence de condensat généralisé implique l'absence de condensat à l'échelle). Nous allons donner quelques exemples pour montrer que dans le cas d'un gaz de Bose dans les trois classes de boîte de Casimir ($\alpha_1 < 1/2$, $= 1/2$, $> 1/2$), à partir du condensat à l'échelle on peut distinguer les différents types de condensat généralisé (I,II,III)

Proposition 1.2 *Le choix particulier de vitesse $\eta(V) = O(1/V^{1/2})$ est un seuil important pour affiner la discrimination entre les différents types de condensat généralisé pour les boîtes de Casimir. Si par exemple on prend $\eta_\delta(V) = 2\pi/V^{(1/2-\delta)}$ such that $\delta > 0$, alors on obtient :*

$$\begin{aligned} \rho_{\eta_\delta}(\beta, \rho) &= \rho_0(\beta, \rho) , & \text{for } \alpha_1 \leq 1/2 , \\ \rho_{\eta_\delta}(\beta, \rho) &= 0 , & \text{for } \alpha_1 > 1/2 + \delta , \\ \rho_{\eta_\delta}(\beta, \rho) &= \rho_0(\beta, \rho) , & \text{for } 1/2 + \delta > \alpha_1 > 1/2 . \end{aligned}$$

Pour $\alpha_1 = 1/2$ et $\eta_\Gamma(V) := 2\pi\Gamma/V^{1/2}$, on trouve une modification des densités condensées de type II en fonction de Γ :

$$\rho_{\eta_\Gamma}(\beta, \rho) = \sum_{|n_1| \leq \Gamma} \frac{1}{\pi \lambda_\beta^2 n_1^2 + B} < \rho_0(\beta, \rho) .$$

où B est l'unique solution de l'équation (1.11).

Pour le cas $\alpha_1 > 1/2$ et $\eta_{\Gamma'}(V) := 2\pi\Gamma'/V^{1-\alpha_1}$, on trouve une modification des densités condensées de type III en fonction de Γ :

$$\rho_{\eta_{\Gamma'}}(\beta, \rho) = \int_{\mathbb{R}^+} d\zeta \frac{e^{-C\zeta}}{\zeta^{1/2} \lambda_\beta} \operatorname{erf}(\Gamma' \lambda_\beta \sqrt{\zeta \pi}) < \rho_0(\beta, \rho) ,$$

où $\operatorname{erf}(\cdot)$ est la fonction d'erreur de Gauss et où C est l'unique solution de l'équation (1.12).

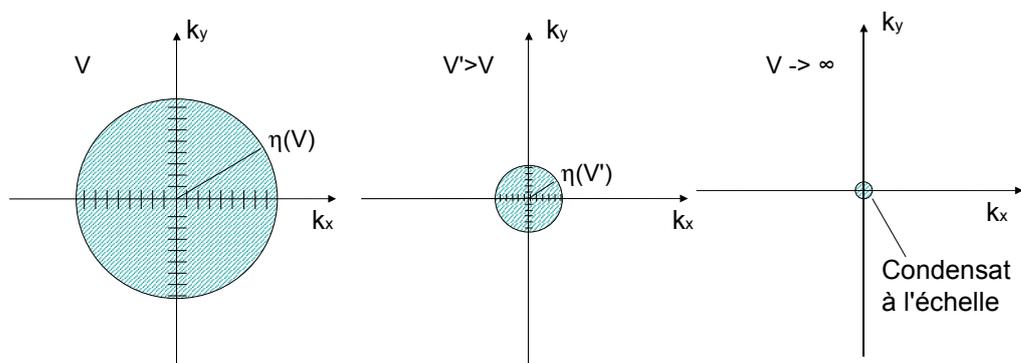


FIG. 1.4 – Figure représentant la construction du condensat de Bose-Einstein à l'échelle pour une fonction η , voir la définition 1.5

1.3. LA CLASSIFICATION DE LA CONDENSATION (I,II,III) IMPLIQUE T-ELLE UNE HIERARCHIE POUR LES CYCLES LONGS ?

Preuve : D'après les preuves des théorèmes 1.4, 1.5 et 1.6 avec les différents choix de fonction $\eta(V)$, nous obtenons les résultats. \square

Notons que cette méthode d'échelle pour la condensation est physiquement plus intuitive que la CBE généralisée car on comprend que le condensat se répartit dans une bande d'énergie que l'on peut calculer en fonction des tailles de la boîte. On retrouve cette idée dans la littérature de physique théorique [18], [33], énoncé de la manière suivante : soit N_0 le nombre de particules condensées, alors on dit que le condensat est fragmenté si $N_0 = n_1 + n_2 + \dots + n_M$ avec $n_i = O(N)$ et $M = O(1)$, (où n_i sont les nombres de particules dans les états condensés), et quasi-condensés si $n_i = O(N^\delta)$ et $M = O(N^{1-\delta})$, $\delta < 1$ (de telle sorte que $N_0 = O(N)$).

Ainsi nous avons un résultat important d'un point de vue épistémologique de correspondance entre les différentes terminologies utilisés en Physique Mathématique et en Physique Théorique :

- (i) Le condensat usuel ou conventionnel est un condensat généralisé de type I dans le cas particulier du seul état fondamental peuplé
- (ii) Le condensat fragmenté est un condensat généralisé de type I ou II
- (iii) Le quasi-condensat est un condensat généralisé de type III

Dans la suite de la thèse j'utiliserai cette classification équivalente avec les deux terminologies.

1.3 La classification de la condensation (I,II,III) implique t-elle une hierarchie pour les cycles longs ?

Nous allons dans cette section étudier la classification CBE généralisée pour les cycles longs. Le résultat pour le cas du gaz parfait dans une boîte de Casimir est que les différents types de condensats généralisés I,II et III sont reliés à différentes hiérarchies de cycles longs, à savoir macroscopiques pour le cas I et II et mésoscopiques pour le cas III.

1.3.1 Approche d'échelle pour les cycles

Premièrement nous allons définir les notions de cycles courts et longs, de manière analogue à notre définition du CBE à l'échelle.

Définition 1.6 *Pour un gaz de Bose dans des boîtes parallélépipédiques Λ , il existe des cycles longs à l'échelle $\lambda(V)$, où $\lambda : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{N}^+$ est une fonction positive et*

croissante de telle sorte que $\lim_{V \uparrow \infty} \lambda(V) = \infty$, si :

$$\rho_{\text{long},\lambda}(\beta, \rho) := \liminf_{V \uparrow \infty} \sum_{j \geq \lambda(V)} \rho_{\Lambda,j}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)) > 0,$$

où $\rho_{\Lambda,j}(\beta, \mu)$ est défini par l'équation (1.20) et $\bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)$ est l'unique solution de l'équation $\rho = \rho_{\Lambda}(\beta, \mu)$.

Comme pour la section précédente, nous pouvons faire des remarques similaires. Les deux définitions 1.4 et 1.6 ne sont pas équivalentes à cause de l'échelle choisie pour la fonction λ . Le lemme suivant donne la relation entre les deux valeurs de densités de particules dans les cycles longs par les deux définitions :

Lemme 1.2 *Dans le cas particulier du gaz parfait de Bose dans des boîtes de Casimir, pour toute fonction $\lambda(V)$ on a :*

$$0 \leq \rho_{\text{long},\lambda}(\beta, \rho) \leq \rho_{\text{long}}(\beta, \rho),$$

pour toute fonction $\lambda(V)$ croissante. Ici $\rho_{\text{long}}(\beta, \rho)$ est donné par (1.24).

De là vient l'assertion logique suivante : l'existence de cycles longs à l'échelle implique l'existence de cycles longs (infinis) (et par contraposition l'absence de cycles longs implique l'absence de cycles longs à l'échelle)

Nous allons donner quelques exemples pour montrer que dans le cas d'un gaz de Bose dans les trois classes de boîtes de Casimir ($\alpha_1 < 1/2$, $= 1/2$, $> 1/2$), à partir du CBE à l'échelle on peut distinguer les différents types de condensats généralisés (I,II,III)

Proposition 1.3 *Si $\lambda(V) = V^\delta$ alors pour $\rho \geq \rho_c(\beta)$ on obtient :*

$$\begin{aligned} \rho_{\text{long},\lambda}(\beta, \rho) &= 0, \text{ pour } \delta > 1, \\ \rho_{\text{long},\lambda}(\beta, \rho) &= \rho_0(\beta, \rho), \text{ pour } \alpha_1 \leq 1/2, 0 < \delta < 1, \\ \rho_{\text{long},\lambda}(\beta, \rho) &= 0, \text{ pour } \alpha_1 > 1/2, 2(1 - \alpha_1) < \delta. \\ \rho_{\text{long},\lambda}(\beta, \rho) &= \rho_0(\beta, \rho), \text{ pour } \alpha_1 > 1/2, 0 < \delta < 2(1 - \alpha_1), \end{aligned}$$

Preuve : En adaptant les preuves des théorèmes 1.4, 1.5 et 1.6 avec les différents choix de δ nous obtenons les résultats. \square

Nous allons maintenant définir les notions de *cycles courts* et de *cycles longs* :

Définition 1.7 *Si $j : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{N}^+$ est une fonction bornée positive et croissante i.e. $\lim_{V \uparrow \infty} j(V) = j < \infty$, alors $\rho_{\Lambda,j(V)}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho))$ est la densité de particules dans les cycles courts de taille j*

Définition 1.8 Si $j : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{N}^+$ est une fonction positive et croissante de telle sorte que $\lim_{V \uparrow \infty} j(V) = \infty$, alors $\rho_{\Lambda, j(V)}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho))$ est la densité de particules dans les cycles longs à l'échelle $j(V)$.

Il existe alors une classification naturelle des cycles longs :

- si $\lim_{V \uparrow \infty} (j(V)/V) = 0$, on dit que $\rho_{\Lambda, j(V)}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho))$ est la densité de particules dans les cycles mésoscopiques de taille $j(V)$,
- si $0 < \lim_{V \uparrow \infty} (j(V)/V) < \infty$, on dit que $\rho_{\Lambda, j(V)}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho))$ est la densité de particules dans les cycles macroscopiques de tailles $j(V)$,
- si $\lim_{V \uparrow \infty} (j(V)/V) = \infty$, on dit que $\rho_{\Lambda, j(V)}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho))$ est la densité de particules dans les cycles de large échelle de tailles $j(V)$,

Pour comprendre l'idée de cycles longs énoncée dans la définition 1.8, prenons l'exemple suivant : soit un cycle de taille $j = V^\alpha$, si $\alpha = 1$ on dit que ce cycle est macroscopique et si $\alpha < 1$ on dit que ce cycle est mésoscopique, il existe aussi le cas exotique $\alpha > 1$ (qui ne nous concerne pas ici) pour lequel le cycle est de large échelle.

Bien sur il peut exister d'autres cas, par exemple on peut avoir un cycle $j = \ln(V)$, de type mésoscopique qui croit logarithmiquement vers l'infini.

Dans le chapitre 4, nous verrons un autre cas de cycles mésoscopiques pour un modèle de boîte de van den Berg étudiées dans le chapitre 2 : $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$, où $L_1 = L_2 = L_3 e^{\alpha L_3}$, $\alpha > 0$. Dans ce cas les cycles longs ont une taille de l'ordre de $e^{2\gamma(\beta, \rho)L_3}$, où $\gamma(\beta, \rho) < \alpha$ pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$ et $\gamma(\beta, \rho) = \alpha$ pour $\rho > \rho_m(\beta)$, $\rho_m(\beta)$ est la seconde densité critique qui existe pour ce modèle.

1.3.2 Hierarchie pour les cycles longs

Les deux définitions 1.7, 1.8 nous mènent naturellement à proposer une hiérarchie de cycles longs, caractérisées par leur taille à l'échelle des longueurs de la boîtes, pouvant exister dans le gaz de Bose lorsque les cycles infinis existent. Ainsi cette hiérarchie permet de décoder la structure des longs cycles apparaissant dans le condensat généralisé et même plus précisément dans le condensat à l'échelle et nous verrons dans le chapitre 4, que pour deux condensats obtenus avec différentes échelles, nous trouverons deux différentes hiérarchies de cycles longs.

Nous définissons à présent la notion d'existence de cycles longs pour chaque échelle de taille comme l'existence d'une densité de particules non nulle dans ces cycles :

Définition 1.9 On dit que pour le gaz de Bose il existe des cycles longs à l'échelle $\lambda(V)$ où $\lambda : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ est une fonction positive et croissante, s'il existe deux nombres positifs x et y de sorte que :

$$\lim_{V \uparrow \infty} \sum_{j=x\lambda(V)}^{y\lambda(V)} \rho_{\Lambda, j}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)) > 0 ,$$

où $\bar{\mu}_\Lambda(\beta, \rho)$ est l'unique solution de l'équation $\rho = \rho_\Lambda(\beta, \mu)$. Alors la densité totale de particules dans les cycles longs à l'échelle $\lambda(V)$ est :

$$\rho_{\text{long}}(\beta, \rho | \lambda) := \lim_{x \downarrow 0; y \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{j=x\lambda(V)}^{y\lambda(V)} \rho_{\Lambda, j}(\beta, \bar{\mu}_\Lambda(\beta, \rho)).$$

Ainsi nous obtenons une classification des différents types de cycles longs pouvant exister :

Définition 1.10

- On dit que pour le gaz de Bose il existe des cycles macroscopiques s'il existe des cycles longs à l'échelle $\lambda(V) = V$.
- On dit que pour le gaz de Bose il existe des cycles mésoscopiques s'il existe des cycles longs à une échelle $\lambda(V)$ plus petite que V (i.e $\lim_{V \uparrow \infty} (\lambda(V)/V) = 0$).

Nous illustrons dans cette proposition les différentes hierarchies de cycles longs intervenant pour le modèle de boîte de Casimir que nous étudierons dans la section suivante.

Proposition 1.4 Soit x et y deux nombres réels positifs , alors on a :

$$\begin{aligned} \lim_{\Lambda} \sum_{j=xV^\delta}^{yV^\delta} \rho_{\Lambda, j}(\beta, \bar{\mu}_\Lambda(\beta, \rho)) &= (e^{-xA} - e^{-yA})\rho_0(\beta, \rho), \text{ pour } \alpha_1 < 1/2, \delta = 1, \\ &= (e^{-xB} - e^{-yB})\rho_0(\beta, \rho), \text{ pour } \alpha_1 = 1/2, \delta = 1, \\ &= (e^{-xC} - e^{-yC})\rho_0(\beta, \rho) \text{ pour } \alpha_1 > 1/2, \delta = 2(1 - \alpha_1). \end{aligned}$$

où A, B, C sont les uniques solutions respectivement des équations (1.10), (1.11), (1.12).

Ainsi nous voyons que pour les deux classes de boites $\alpha_1 < 1/2$ et $\alpha_1 = 1/2$, pour lesquelles le condensat généralisé est de type I et II respectivement, nous avons une présence de cycles macroscopiques alors que dans le cas $\alpha_1 > 1/2$, pour lequel le condensat généralisé est de type III, les cycles longs sont mésoscopiques, ce qui peut paraître intuitif car le CBE est réparti sur un ensemble de modes où chaque mode contient un nombre mésoscopique de particules. Si cela paraît intuitif dans le résultat, rien était à priori certain dans ce sens car le CBE généralisé, même de type III, contient un nombre total de particules macroscopique et donc d'un point de vue statistique, on aurait pu penser que les cycles resteraient macroscopiques. Mais ceci n'est pas le cas ce qui donne une interprétation différente du condensat de type III qui peut-être vu comme *un ensemble de condensat mésoscopiques*, "indépendants" d'un point de vue statistique et nous le verrons dans la section 1.4, d'un point de vue cohérence quantique. Ainsi cette approche d'échelle nous donne une vision plus fine de la structure du condensat généralisé et de son interprétation comme objet macroscopique en tant qu'ensemble macroscopique ou mésoscopique.

Un autre point tend à être soulevé sur l'application de cette approche hiérarchique des cycles à des études numériques des cycles pour des boîtes anisotropes, avec les méthodes existentes [44], [45]. Dans ce type d'étude, je pense qu'il serait possible d'observer des formations de paquets de cycles à l'échelle mésoscopiques et dans un cas très anisotrope comme le modèle de boîte de van den Berg du chapitre 2 et 4 (et même le chapitre 3 pour le piège), une densité critique de transition faisant passer d'un régime où les cycles se répartissent par paquets mésoscopiques à un régime où les cycles deviennent macroscopiques.

1.3.3 Condensation généralisée et cycles longs dans les boîtes de Casimir

Cas : $\alpha_1 < 1/2$

Dans ce cas, la géométrie est semblable au cas habituel de géométrie cubique. Notre résultat principal est que le condensat généralisé de type I implique l'existence de cycles macroscopiques dans l'état fondamental.

Theorème 1.4 *Si nous prenons les boîtes de Casimir avec $1/2 > \alpha_1$, alors pour une densité de particules fixe $\rho > \rho_c(\beta)$ le potentiel chimique est $\bar{\mu}_\Lambda := \bar{\mu}_\Lambda(\beta, \rho) = -A/\beta V + o(1/V)$, avec $A > 0$. Il existe alors un condensat de Bose-Einstein généralisé de type I dans le mode fondamental et à l'échelle $\eta_I(V) = 1/V$ ainsi que des cycles macroscopiques dans ce mode. Nous trouvons A comme l'unique solution de (1.10).*

Preuve : D'après la relation (1.1) on note par Λ_I^* l'ensemble des modes pour ce cas de boîtes de Casimir $\alpha < 1/2$:

$$\Lambda_I^* := \left\{ k \in \mathbb{R}^3 : k = \left(\frac{2\pi n_1}{V^{\alpha_1}}, \frac{2\pi n_2}{V^{\alpha_2}}, \frac{2\pi n_3}{V^{\alpha_3}} \right); n_\nu \in \mathbb{Z}^1; 1/2 > \alpha_1 \right\}. \quad (1.27)$$

Soit $\Lambda_{0,I}^*$ un sous ensemble de Λ_I^* défini par :

$$\Lambda_{0,I}^* = \{k \in \Lambda_I^* : \|k\| \leq \eta_I(V)\}, \quad (1.28)$$

où $\eta_I(V) = 1/V$. Alors nous avons $\Lambda_{0,I}^* = \{k = 0\}$.

Ecrivons la densité totale de particules comme une somme sur les cycles courts et longs :

$$\rho := \lim_{V \uparrow \infty} \rho_\Lambda(\beta, \bar{\mu}_\Lambda) = \rho_{\text{short}}(\beta, \rho) + \rho_{\text{long}}(\beta, \rho), \quad (1.29)$$

c.f. (1.23), (1.24).

Nous pouvons décomposer la densité de particules dans les cycles longs en deux parties :

$$\rho_{\text{long}}(\beta, \rho) := \rho_{\text{long}}(\Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*) + \rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,I}^*), \quad (1.30)$$

où $\rho_{\text{long}}(\Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*)$ est la densité de particules dans les cycles longs en dehors de $\Lambda_{0,I}^*$:

$$\rho_{\text{long}}(\Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*) := \lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*} \sum_{j=M}^{\infty} \rho_{\Lambda,j}(k) \right), \quad (1.31)$$

où la répartition spectrale de la densité de particules dans les cycles de taille j est :

$$\rho_{\Lambda,j}(k) := \frac{1}{V} e^{j\beta\bar{\mu}_{\Lambda}} e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)},$$

et $\bar{\mu}_{\Lambda} := \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \mu)$ est la solution de l'équation de $\rho = \rho_{\Lambda}(\beta, \mu)$.

Premièrement nous pouvons estimer la densité de particules dans les cycles longs dans $\Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*$ d'après (1.31) et d'après l'asymptotique $\bar{\mu}_{\Lambda}$ nous obtenons :

$$\begin{aligned} \rho_{\text{long}}(\Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*} \sum_{j=M}^{\infty} \frac{1}{V} e^{j\beta\bar{\mu}_{\Lambda}} e^{-j\beta\epsilon_{\Lambda}(k)} \right), \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{j=M}^{\infty} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} dk e^{-j\pi\lambda_{\beta}^2 k^2}, \\ &= 0. \end{aligned}$$

Par conséquent il n'y a pas de cycles longs dans $\Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*$ et puisque notre dernière estimation est valide pour tout $M \rightarrow \infty$, on conclut qu'il n'y a pas de cycles longs à n'importe quelle échelle dans $\Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*$ (voir la définition 1.6).

Maintenant étudions les modes dans $\Lambda_{0,I}^*$, nous voulons prouver que pour le gaz parfait de Bose il existe des cycles macroscopiques.

Comme $\bar{\mu}_{\Lambda} = -A/\beta V + o(1/V)$, avec $A > 0$ nous avons :

$$\begin{aligned} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,I}^* | \text{macro}) &:= \lim_{x \downarrow 0; y \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{j=xV}^{yV} \frac{1}{V} e^{j\beta\bar{\mu}_{\Lambda}} \\ &= \lim_{x \downarrow 0; y \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \frac{(e^{-xA+o(1)} - e^{-yA+o(1)})}{e^{-\beta\bar{\mu}_{\Lambda}} - 1} \\ &= \lim_{V \uparrow \infty} \frac{1}{e^{-\beta\bar{\mu}_{\Lambda}} - 1} = \lim_{V \uparrow \infty} \rho_{\Lambda}(\Lambda_{0,I}^*), \end{aligned} \quad (1.32)$$

où $\rho_{\Lambda}(\Lambda_{0,I}^*) := \sum_{k \in \Lambda_{0,I}^*} \rho_{\Lambda}(k)$ est la densité de particules dans $\Lambda_{0,I}^*$.

Nous pouvons facilement calculer $\rho_{\Lambda}(\Lambda_{0,I}^*)$:

$$\rho_{\Lambda}(\Lambda_{0,I}^*) = \frac{1}{V} \frac{1}{e^{-\beta\bar{\mu}_{\Lambda}} - 1} = \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta \frac{A}{\beta V} + o(\frac{1}{V})} - 1} = \frac{1}{A} + o(1). \quad (1.33)$$

Donc en vertu de (1.30), (1.32) et (1.33) :

$$\rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,I}^* | \text{macro}) = \rho_{\text{long}}(\beta, \rho) = \frac{1}{A}, \quad (1.34)$$

Nous savons d'après le théorème 1.3 que la densité de particules dans les cycles courts est égale à la densité critique. Par conséquent en vertu de (1.29), (1.34) nous pouvons conclure la preuve du théorème. \square

1.3. LA CLASSIFICATION DE LA CONDENSATION (I,II,III) IMPLIQUE T-ELLE
UNE HIERARCHIE POUR LES CYCLES LONGS?

Cas : $\alpha_1 = 1/2$

Le résultat principal du théorème sur la condensation généralisée de type II, est l'existence de cycles macroscopiques dans un nombre infini (en limite thermodynamique) de modes.

Theorème 1.5 *Si nous prenons les boites de Casimir avec $1/2 = \alpha_1$, alors pour une densité de particules fixe $\rho > \rho_c(\beta)$ le potentiel chimique est $\bar{\mu}_\Lambda := \bar{\mu}_\Lambda(\beta, \rho) = -B/\beta V + o(1/V)$, avec $B > 0$. Il existe alors un condensat de Bose-Einstein généralisé de type II dans un ensemble infini de modes et à l'échelle $\eta_{II}(V) = 2\pi\Gamma/V$, $\Gamma \geq 1$ ainsi que des cycles macroscopiques dans ces modes. Nous trouvons B comme l'unique solution de (1.11).*

Preuve : D'après la relation (1.1) on note Λ_{II}^* l'ensemble des modes pour ce cas de boîte de Casimir $\alpha = 1/2$:

$$\Lambda_{II}^* = \left\{ k \in \mathbb{R}^3 : k = \left(\frac{2\pi n_1}{V^{\alpha_1}}, \frac{2\pi n_2}{V^{\alpha_2}}, \frac{2\pi n_3}{V^{\alpha_3}} \right); n_\nu \in \mathbb{Z}^1; 1/2 = \alpha_1 \right\}, \quad (1.35)$$

Soit $\Lambda_{0,II}^*$ un sous ensemble de Λ_{II}^* définit par :

$$\Lambda_{0,II,\Gamma}^* = \{ k \in \Lambda_{II}^* : \|k\| \leq \eta_{II}^\Gamma(V) \}, \quad (1.36)$$

where :

$$\eta_{II}^\Gamma(V) := \frac{2\pi\Gamma}{V^{1/2}}, \Gamma \in \mathbb{N}^*, \quad (1.37)$$

Notons que cet ensemble contient tout le condensat ainsi que toutes les particules dans les cycles longs pour $\Gamma \rightarrow \infty$ après la limite thermodynamique.

Ecrivons la densité totale de particules comme une somme sur les cycles courts et longs :

$$\rho_{\text{long}}(\beta, \rho) = \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{II}^* \setminus \Lambda_{0,II,\Gamma}^*) + \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,II,\Gamma}^*). \quad (1.38)$$

Nous devons prendre la limite $\Gamma \rightarrow \infty$ pour avoir la totalité du condensat dans la première partie.

Le premier terme de la partie de droite de l'équation (1.38) est :

$$\begin{aligned} \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{II}^* \setminus \Lambda_{0,II,\Gamma}^*) &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{M \uparrow \infty} \lim_{\Lambda} \left(\sum_{j=M}^{\infty} \frac{1}{V} e^{-j\beta C/V} \sum_{\|k\| > 2\pi\Gamma/\sqrt{V}} e^{-j\beta\epsilon_\Lambda(k)} \right) \\ &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{M \uparrow \infty} \lim_{\Lambda} \left(\sum_{j=M}^{\infty} \frac{1}{V} e^{-j\beta C/V} \sum_{1/V^{1/2-\epsilon} < \|k\| < 2\pi\Gamma/\sqrt{V}} e^{-j\beta\epsilon_\Lambda(k)} \right) \\ &+ \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{M \uparrow \infty} \lim_{\Lambda} \left(\sum_{j=M}^{\infty} \frac{1}{V} e^{-j\beta C/V} \sum_{\|k\| > 1/V^{1/2-\epsilon}} e^{-j\beta\epsilon_\Lambda(k)} \right), \quad (1.39) \end{aligned}$$

avec $1/2 - \epsilon > \alpha_2$. Alors calculons le second terme de l'équation (1.39) :

$$\lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{M \uparrow \infty} \lim_{\Lambda} \left(\sum_{j=M}^{\infty} \frac{1}{V} e^{-j\beta C/V} \sum_{\|k\| > 1/V^{1/2-\epsilon}} e^{-j\beta \epsilon_{\Lambda}(k)} \right) = \lim_{M \uparrow \infty} \sum_{j=M}^{\infty} \frac{1}{j^{3/2} \lambda_{\beta}^3} = 0.$$

Le premier terme de l'équation (1.39) possède une borne supérieure :

$$\lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{\Lambda} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{V} e^{-j\beta C/V} \sum_{1/V^{1/2-\epsilon} < \|k\| < 2\pi\Gamma/\sqrt{V}} e^{-j\beta \epsilon_{\Lambda}(k)} \right) \leq \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \sum_{|n_1| > \Gamma} \frac{1}{\pi \lambda_{\beta}^2 n_1^2 + B} = 0.$$

Par conséquent le premier terme de (1.39) est nul et donc $\lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{II}^* \setminus \Lambda_{0,II,\Gamma}^*) = 0$.

Maintenant considérons les modes dans $\Lambda_{0,II,\Gamma}^*$. Nous voulons appliquer la même stratégie que pour la preuve du théorème 1.4 pour montrer que pour le gaz parfait de Bose il existe des cycles macroscopiques.

Comme $\bar{\mu}_{\Lambda} = -B/\beta V + o(1/V)$, avec $B > 0$ nous avons :

$$\begin{aligned} \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,II,\Gamma}^* | \text{macro}) &:= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{x \downarrow 0; y \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{k \in \Lambda_{0,II}^*} \sum_{j=xV}^{yV} \rho_{\Lambda,j}(k) \\ &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{x \downarrow 0; y \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{k \in \Lambda_{0,II,\Gamma}^*} \frac{(e^{-xB+o(1)} - e^{-yB+o(1)})}{e^{\beta(\epsilon_{\Lambda}(k) - \bar{\mu}_{\Lambda})} - 1} \\ &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{k \in \Lambda_{0,II,\Gamma}^*} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\Lambda}(k) - \bar{\mu}_{\Lambda})} - 1} \\ &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{0,II,\Gamma}^*} \rho_{\Lambda}(k) \right). \end{aligned} \quad (1.40)$$

Nous pouvons facilement calculer :

$$\begin{aligned} \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{0,II,\Gamma}^*} \rho_{\Lambda}(k) \right) &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{n_1 = -\Gamma}^{\Gamma} \frac{1}{V} \frac{1}{e^{\beta(\pi \lambda_{\beta}^2 n_1^2 / V + B/V + o(1/V))} - 1} \\ &= \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^1} \frac{1}{B + \pi \lambda_{\beta}^2 n_1^2}. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Donc en vertu de (1.38), (1.40) et (1.41) :

$$\lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,II,\Gamma}^* | \text{macro}) = \rho_{\text{long}}(\beta, \rho) = \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^1} \frac{1}{B + \pi \lambda_{\beta}^2 n_1^2}, \quad (1.42)$$

Nous savons d'après le théorème 1.3 que la densité de particules dans les cycles courts est égale à la densité critique. Par conséquent en vertu de (1.29), (1.42) nous pouvons conclure la preuve du théorème. \square

Cas : $\alpha_1 > 1/2$

Notre résultat principal dans ce théorème pour la condensation généralisée de type III est la présence de *cycles mésoscopiques* dans un nombre infini de modes en la limite thermodynamique.

Theorème 1.6 *Si nous prenons les boites de Casimir avec $1/2 < \alpha_1$, alors pour une densité de particules fixe $\rho > \rho_c(\beta)$ le potentiel chimique est $\bar{\mu}_\Lambda(\beta, \rho) = -C/\beta V^\delta + o(1/V^\delta)$, avec $\delta = 2(1 - \alpha_1)$ et $C > 0$. Il existe alors un condensat de Bose-Einstein généralisé de type III dans un ensemble infini de modes et à l'échelle $\eta_{III}(V) = 2\pi\Gamma/V^\delta$, $\Gamma \geq 1$ ainsi que des cycles mésoscopiques de taille de l'ordre de V^δ dans ces modes. Nous trouvons C comme l'unique solution de (1.12).*

Preuve : D'après la relation (1.1), nous notons l'ensemble des modes Λ_{III}^* pour le cas $\alpha_1 > 1/2$:

$$\Lambda_{III}^* = \left\{ k \in \mathbb{R}^3 : k = \left(\frac{2\pi n_1}{V^{\alpha_1}}, \frac{2\pi n_2}{V^{\alpha_2}}, \frac{2\pi n_3}{V^{\alpha_3}} \right); n_i \in \mathbb{Z}^1; \alpha_1 > 1/2 \right\}. \quad (1.43)$$

Soit $\Lambda_{0,III,\Gamma}^*$ un sous ensemble de Λ_{III}^* :

$$\Lambda_{0,III,\Gamma}^* = \{ k \in \Lambda_{III}^* : \|k\| \leq \eta_{III}^\Gamma(V) \}, \quad (1.44)$$

où :

$$\eta_{III}^\Gamma(V) := \frac{2\pi\Gamma}{V^{\delta/2}}, \quad \Gamma \in \mathbb{N}^*, \quad (1.45)$$

avec $\delta = 2(1 - \alpha_1) < 1$.

Nous allons montrer que $\Lambda_{0,III,\Gamma}^*$ contient toute la valeur de la densité de particules condensées ainsi que la densité de particules dans les cycles longs lorsque $\Gamma \rightarrow \infty$.

Avant de présenter des arguments formels, notons une différence qualitative entre le cas $\alpha_1 > 1/2$ et $\alpha_1 \leq 1/2$. D'après la définition de $\eta_{III}^\Gamma(V)$ (1.45), nous voyons que le nombre d'états de $\Lambda_{0,III,\Gamma}^*$ est de l'ordre $O(V^{2\alpha_1-1})$ qui tend vers l'infini, lorsque le volume tend vers l'infini, il y a beaucoup plus de modes condensés que dans $\Lambda_{0,II,\Gamma}^*$ (défini par (1.36)). Heuristiquement on peut dire que $\Lambda_{0,III,\Gamma}^*$ contient des cycles longs de tailles de l'ordre $O(V^\delta)$ dans un nombre de modes de l'ordre $O(V^{2\alpha_1-1})$. Ainsi, le nombre de particules dans ces cycles longs est de l'ordre $O(V^\delta)O(O(V^{2\alpha_1-1})) = O(V)$, ce qui est macroscopique. Pour cette raison, il existe un condensat macroscopique formé par l'accumulation des condensats mésoscopiques (l'ordre du nombre de particules est $O(V^{2\alpha_1-1})$, ce qui est plus petit que $O(V)$) ainsi que par l'accumulation des cycles longs mésoscopiques dans chaque modes condensés dans $\Lambda_{0,III,\Gamma}^*$.

On décompose la densité de particules comme une somme sur les cycles courts et longs :

$$\rho_{\text{long}}(\beta, \rho) = \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{III}^* \setminus \Lambda_{0,III,\Gamma}^*) + \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,III,\Gamma}^*). \quad (1.46)$$

Avec le même argument que pour la preuve du théorème 1.5, on trouve que le premier terme du membre de droite de l'équation (1.46) est nul.

Regardons maintenant les modes dans $\Lambda_{0,III,\Gamma}^*$. Pour ce cas, nous voulons prouver que pour le gaz parfait de Bose il existe des cycles mésoscopiques de l'ordre de $O(V^\delta)$, $\delta = 2(1 - \alpha_1) < 1$,

Puisque $\bar{\mu}_\Lambda = -C/\beta V^\delta + o(1/V^\delta)$ avec $\delta = 2(1 - \alpha_1)$ et $C > 0$ on obtient :

$$\begin{aligned} \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,III,\Gamma}^* | \text{micro}) &:= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{x \downarrow 0; y \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{k \in \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \sum_{j=xV^\delta}^{yV^\delta} \frac{1}{V} e^{j\beta\bar{\mu}_\Lambda} e^{-j\beta\epsilon_\Lambda(k)} \\ &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{x \downarrow 0; y \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \sum_{k \in \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \frac{(e^{-xC+o(1)} - e^{-yC+o(1)})}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k) - \bar{\mu}_\Lambda)} - 1} \\ &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) \right). \end{aligned} \quad (1.47)$$

On peut facilement calculer :

$$\begin{aligned} &\lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) \right) \\ &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\frac{1}{V^\delta} \frac{1}{V^{2\alpha_1-1}} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(j/V^\delta)C} \sum_{n_1: |n_1/V^{2\alpha_1-1}| \leq \Gamma} e^{-\pi\lambda_\beta^2(j/V^\delta)(n_1/V^{2\alpha_1-1})^2} \right). \end{aligned}$$

Comme cette expression est la limite d'une double somme de Darboux-Riemann, en limite thermodynamique nous obtenons une double intégrale :

$$\lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) \right) = \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \int_{\mathbb{R}^+} d\zeta e^{-\zeta C} \int_{-\Gamma}^{\Gamma} d\xi e^{-\zeta\pi\lambda_\beta^2\xi^2} = \int_{\mathbb{R}^+} d\zeta \frac{e^{-\zeta C}}{\sqrt{\zeta}\lambda_\beta} = \frac{\sqrt{\pi}}{C^{1/2}\lambda_\beta} \quad (1.48)$$

D'où :

$$\lim_{\Gamma \uparrow \infty} \rho_{\text{long}}(\Lambda_{0,III,\Gamma}^* | \text{micro}) = \rho_{\text{long}}(\beta, \rho) = \frac{\sqrt{\pi}}{C^{1/2}\lambda_\beta}, \quad (1.49)$$

en vertu de (1.46), (1.47) et (1.48).

Nous savons d'après le théorème 1.3 que la densité de particules dans les cycles courts est égale à la densité critique. Par conséquent en vertu de (1.29), (1.49) nous pouvons conclure la preuve du théorème. \square

1.4 La classification de condensation (I,II,III) implique-t-elle une hiérarchie pour les corrélations ?

Dans la section nous avons présenté trois concepts autour de la condensation de Bose-Einstein :

1.4. LA CLASSIFICATION DE CONDENSATION (I,II,III) IMPLIQUE T-ELLE UNE HIERARCHIE POUR LES CORRÉLATIONS ?

- la condensation de Bose-Einstein généralisée, énoncée par van den Berg, Lewis et Pulé (1986) [28]
- les cycles longs (infinis), introduit par Feynman (1953) [8]
- l'ordre à longue portée (dit "Off Diagonal Long Range Order" (ODLRO) en anglais), de Penrose et Onsager (1956) [9]

Ensuite pour une étude plus fine des deux premiers concepts, nous avons dans les sections 1.2, 1.3 revisité ces concepts en introduisant des notions basées sur une approche d'échelle :

- la condensation de Bose-Einstein à l'échelle et une classification type I, II, III reliées aux notions de condensat conventionnel, de condensat fragmenté et de quasi-condensat
- les cycles longs à des échelles hiérarchisées pour les longueurs de cycles : mésoscopiques et macroscopiques

Pour le cas d'un gaz parfait de bosons dans une boîte, nous avons montré dans le cas du modèle de boîtes de Casimir (et de van den Berg dans les chapitre 2 et 4) que la classification de CBE généralisée et à l'échelle est reliée à la hiérarchie de cycles : les CBE de types I et II, respectivement type III sont équivalent à l'existence cycles longs macroscopiques, respectivement mésoscopiques.

La question naturelle qui se pose est qu'en est-il du concept de corrélation longue portée ? Pouvons nous introduire une approche d'échelle pour les étudier et existe t-il une hiérarchie de longue portée ? En fait tout l'intérêt physique de l'approche d'échelle se trouve dans l'étude des corrélations et donc de la cohérence quantique des différents condensats (types I, II, III) car c'est justement ce qui peut se mesurer expérimentalement au sens d'une longueur dit *longueur de cohérence* avec un processus d'interférence atomique [16], [17], [19], [46]. Le but de cette section est de donner une définition formelle de la longueur de cohérence à partir de notre approche d'échelle et de montrer qu'elle est reliée aux trois types de condensats généralisés. Dans ce chapitre nous le montrerons pour le modèle du gaz parfait dans des boîtes de Casimir et pour le modèle de boîtes de van den Berg exponentiellement anisotropes dans les chapitres 2 et 3.

1.4.1 Approche des corrélations longue portée à l'échelle

Rappelons tout d'abord la définition de l'ordre à longue portée que nous avons montré équivalent au critère de condensation généralisée d'après le Théorème 1.2 :

$$\sigma(\beta, \rho) := \lim_{\|x-x'\| \uparrow \infty} \sigma(\beta, \rho; x, x'),$$

où $\sigma(\beta, \rho; x, x')$ est la fonction de corrélation à deux points entre les deux points x et x' après la limite thermodynamique. Notez que cette définition n'est pas adaptée à la définition du condensat à l'échelle, puisque on ne précise pas encore quelles sont

les échelles de corrélations par rapport aux échelles de longueurs de la boîte Λ . Il semble intéressant de prendre la limite thermodynamique en même temps que la distance entre les deux points x et x' tend vers l'infini.

Une question naturelle est de savoir si nous sommes en mesure de détecter les différents types de condensat généralisés avec l'aide d'un critère généralisé de corrélations à longue portée basée sur notre approche d'échelle. Nous pouvons procéder comme pour la condensation généralisée et les cycles longs en introduisant une échelle dans la définition de la fonction de corrélation. Le problème est similaire : nous avons dans l'équation (??) qui définit le paramètre d'ordre deux limites successives, l'une thermodynamique et l'autre éloignant les deux points x et x' à l'infini. Ce qui donne envie de procéder à une seule limite, thermodynamique, en choisissant une vitesse de croissance vers l'infini de la distance entre les deux points $x - x'$ en fonction des longueurs de la boîte L_1, L_2, L_3 . Ainsi cette fonction $(x - x')(L_1, L_2, L_3)$ est une échelle de longue portée.

Définition 1.11 *Pour un gaz parfait de Bose dans des boîtes parallélépipédiques $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$, il existe des corrélations à longue portée à l'échelle $X(L_1, L_2, L_3)$ où $X : (L_1, L_2, L_3) \mapsto X(L_1, L_2, L_3) \in \Lambda$ avec $X_\nu = X_\nu(L_\nu)$, de telle sorte que $\lim_{L_\nu \uparrow \infty} |X_\nu(L_\nu)| = \infty$, $\nu = 1, 2, 3$, si :*

$$\sigma_X(\beta, \rho) := \lim_{L_1, L_2, L_3 \uparrow \infty} (\sigma_{\Lambda, X})(L_1, L_2, L_3) > 0, \quad (1.50)$$

où $(\sigma_{\Lambda, X})(L_1, L_2, L_3)$ la fonction de corrélation à deux points pour l'échelle X :

$$(\sigma_{\Lambda, X})(L_1, L_2, L_3) := \sigma_\Lambda(\beta, \rho; x(L_1, L_2, L_3) - x'(L_1, L_2, L_3)) = \sum_{k \in \Lambda^*} \rho_\Lambda(k) e^{ikX(L_1, L_2, L_3)}, \quad (1.51)$$

où $X(L_1, L_2, L_3) = (x - x')(L_1, L_2, L_3) \in \Lambda$, c.f. (1.13) .

Remarque 1.1 *D'après (1.1) et (1.3) on peut écrire (1.13) comme :*

$$\sigma(\beta, \rho; x, x') = \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\bar{\mu}_\Lambda} \prod_{\nu=1}^3 \theta_3\left(\frac{\pi}{V\alpha_\nu}(x_\nu - x'_\nu), e^{-j\pi\frac{\lambda_\beta^2}{V^2\alpha_\nu}}\right), \quad (1.52)$$

où $\theta_3(u, q) := \sum_{n \in \mathbb{Z}^1} q^{n^2} e^{2inu}$ est la fonction elliptique de Théta [47].

Ce qui implique la proposition suivante :

Proposition 1.5 *D'après (1.51) les fonctions de corrélations à deux points (voir les définitions ?? et 1.11) sont des fonctions positives et symétriques et L_ν -périodiques de $x_\nu - x'_\nu$, $\nu = 1, 2, 3$ sur \mathbb{R} , et croissantes/décroissantes sur $[nL_\nu, nL_\nu + L_\nu/2] \subset \mathbb{R}^+$, $n \in \mathbb{N}$, respectivement $[nL_\nu + L_\nu/2, (n+1)L_\nu] \subset \mathbb{R}^+$, $n \in \mathbb{N}$ (i.e. monotone sur la demi-période).*

Preuve : Ces propriétés dérivent des propriétés de la fonction elliptique de theta [47].

□

Les deux définitions 1.3 et 1.11 ne sont pas équivalentes. Le lemme suivant donne la relation entre les deux ordres de longues portées d'un point de vue général :

Lemme 1.3 *Pour toute fonction vecteur $X(L_1, L_2, L_3)$ on a :*

$$0 \leq \sigma_X(\beta, \rho) \leq \sigma(\beta, \rho) .$$

Ce Lemme signifie que l'existence d'un ordre à longue portée à l'échelle implique l'existence d'un ordre à longue portée (et donc que l'absence d'un ordre à longue portée implique l'absence d'un ordre à longue portée à l'échelle)

1.4.2 Hierarchie et anisotropie des corrélations, cohérence du condensat

Ici, nous utilisons la définition 1.11 pour analyser les condensats et les cycles dans les boîtes de Casimir. Notez que le critère habituel de ODLRO est tel que nous n'avons pas d'indication de l'ampleur des corrélations à longue portée parce que nous étudions leurs corrélations après la limite thermodynamique.

Nous introduisons une classification des corrélations à longue portée, formellement définie par :

Définition 1.12 *Pour le gaz parfait de Bose, il existe des corrélations macroscopiques dans la direction x_ν , s'il existe une fonction vectorielle $X(L_1, L_2, L_3) \in \Lambda$ de telle sorte que : $\lim_{V \uparrow \infty} |X_\nu(L_\nu)|/L_\nu > 0$ et $\sigma_X(\beta, \rho) > 0$.*

Définition 1.13 *Pour le gaz parfait de Bose, il existe des corrélations mésoscopiques d'ordre $L_{c,\nu}(L_\nu)$ dans la direction x_ν , s'il n'existe pas de corrélations macroscopiques dans cette direction et s'il existe une fonction vectorielle $X(L_1, L_2, L_3) \in \Lambda$ avec $\lim_{L_\nu \uparrow \infty} |X_\nu(L_\nu)| = \infty$ et $0 < \lim_{L_\nu \uparrow \infty} |X_\nu(L_\nu)|/L_{c,\nu}(L_\nu) < \infty$, de telle sorte que $\sigma_X(\beta, \rho) > 0$ avec $\lim_{L_\nu \uparrow \infty} |X_\nu(L_\nu)|/L_\nu = 0$. S'il n'existe pas de fonction vectorielle $X'(L_1, L_2, L_3) \in \Lambda$ avec $\lim_{L_\nu \uparrow \infty} |X_\nu(L_\nu)| = \infty$ et $0 < \lim_{L_\nu \uparrow \infty} |X_\nu(L_\nu)|/L_{c,\nu}(L_\nu) = 0$, de telle sorte que $\sigma_X(\beta, \rho) > 0$, alors $L_{c,\nu}(L_\nu)$ est la longueur de cohérence mésoscopique dans la direction ν .*

Pour les conditions aux limites périodiques, le système est homogène et il n'y a donc pas de localisation spatiale de la condensation contrairement au cas des conditions aux limites de Dirichlet. Toutefois, la longueur de cohérence du condensat peut être étudiée sur la base des précédentes définitions 1.12 et 1.13.

Theorème 1.7 *Soit un gaz parfait de Bose grand-canonique dans des boites de Casimir $\Lambda = V^{\alpha_1} \times V^{\alpha_2} \times V^{\alpha_3}$ avec les conditions aux bords périodiques, pour une densité de particules fixée ρ . Soit $X : V \in \mathbb{R}^+ \mapsto X(V) = (X_1(V), X_2(V), X_3(V)) \in \Lambda$, $\lim_{V \uparrow \infty} X_\nu(V) = \infty$, $0 < X_\nu(V) \leq V^{\alpha_\nu}/2$, $\nu = 1, 2, 3$. Nous avons alors les résultats suivant concernant les corrélations à longue portée à l'échelle $X(V)$:*

$$\sigma_X(\beta, \rho) = 0, \text{ pour } \rho < \rho_c(\beta), \tag{1.53}$$

tandis que pour $\rho > \rho_c(\beta)$ on a :

(i) pour le cas $\alpha_1 < 1/2$:

$$\sigma_X(\beta, \rho) = \rho_0(\beta) ,$$

(ii) pour le cas $\alpha_1 = 1/2$:

$$\begin{aligned} \sigma_X(\beta, \rho) &= \rho_0(\beta), \text{ pour } \lim_{V \uparrow \infty} (X_1(V)/V^{\alpha_1}) = 0 , \\ &= \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^1} \frac{\cos 2\pi n_1 x}{\pi \lambda_\beta^2 n_1^2 + B} < \rho_0(\beta), \text{ pour } X_1(V) = \frac{x}{2} V^{\alpha_1}, \quad 0 < x < 1, , \end{aligned}$$

(iii) pour le cas $\alpha_1 > 1/2$:

$$\begin{aligned} \sigma_X(\beta, \rho) &= \rho_0(\beta), \text{ pour } \lim_{V \uparrow \infty} (X_1(V)/V^\delta) = 0, \quad \delta = 2(1 - \alpha_1) , \\ &= \rho_0(\beta) e^{-2x\sqrt{\pi c}/\lambda_\beta} < \rho_0(\beta), \text{ pour } X_1(V) = xV^{\delta/2}, \quad x > 0 , \\ &= 0, \text{ pour } \lim_{V \uparrow \infty} (X_1(V)/V^{\delta/2}) = 0 . \end{aligned}$$

Preuve : Pour assurer la décroissance monotone de la fonction de corrélation pour le cas des conditions périodiques, on choisit $0 < X_\nu \leq \frac{1}{2}V^{\alpha_\nu}$, $\nu = 1, 2, 3$, voir la proposition 1.5.

La première étape de la preuve est l'étude du régime $\rho < \rho_c(\beta)$, sans condensat généralisé :

Puisque $\sigma(\beta, \rho) = 0$ (théorème 1.2), d'après le lemme 1.3 on obtient $\sigma_X(\beta, \rho) = 0$ pour tout vecteur $X(V) \in \Lambda$.

La seconde étape est l'étude du régime $\rho > \rho_c(\beta)$ pour lequel nous avons un condensat généralisé :

Pour le cas $\alpha_1 < 1/2$ d'après la définition 1.11 on a :

$$\begin{aligned} \sigma_X(\beta, \rho) &= \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{0,I}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) + \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) \\ &= \lim_{V \uparrow \infty} \left(\frac{1}{V} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-Aj/V} \right) + \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_I^* \setminus \Lambda_{0,I}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) \quad (1.54) \end{aligned}$$

où Λ_I^* est l'ensemble des modes définit par l'équation (1.27) et $\Lambda_{0,I}^* = \{k = 0\}$ est le sous espace correspondant au modes condensés définit par (1.28). Le premier terme de (1.54) est égal à $\rho_0(\beta, \rho)$ en vertu du théorème 1.4, donc étant donné que $\sigma(\beta, \rho) = \rho_0(\beta, \rho)$ (théorème 1.2) et d'après le lemme 1.3 le second terme de (1.54) doit être nul et nous obtenons le résultat.

1.4. LA CLASSIFICATION DE CONDENSATION (I,II,III) IMPLIQUE T-ELLE UNE
HIERARCHIE POUR LES CORRÉLATIONS ?

Pour le cas $\alpha_1 = 1/2$ d'après la définition 1.11 on obtient :

$$\begin{aligned}
\sigma_X(\beta, \rho) &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{0,II,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) + \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{II}^* \setminus \Lambda_{0,II,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) \\
&= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\frac{1}{V} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-Bj/V} \sum_{n_1=-\Gamma}^{\Gamma} e^{-\pi \lambda_\beta^2 n_1^2 (j/V)} e^{2\pi i X_1(V) (n_1/V)} \right) \\
&+ \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{II}^* \setminus \Lambda_{0,II,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) \tag{1.55}
\end{aligned}$$

où Λ_{II}^* est l'ensemble des modes défini par l'équation (1.35) et $\Lambda_{0,II,\Gamma}^*$ est le sous espace correspondant aux modes condensés définis par (1.36).

Si $\lim_{V \uparrow \infty} (X_1(V)/V^{\alpha_1}) = 0$, le premier terme du membre de droite de (1.55) est égal à $\rho_0(\beta, \rho)$ en vertu du théorème 1.5. Etant donné que $\sigma(\beta, \rho) = \rho_0(\beta, \rho)$ (Theorem 1.2) et d'après le lemme 1.3, le second terme de (1.55) est nul et nous obtenons le résultat.

Si $\lim_{V \uparrow \infty} (X_1(V)/V^{\alpha_1}) = x$, $0 < x \leq 1/2$. Puisque la somme sous la limite du premier terme du membre de droite de (1.55) est une somme de Darboux-Riemann, on obtient :

$$\int_{\mathbb{R}^+} d\chi e^{-B\chi} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^1} e^{-\pi \lambda_\beta^2 n_1^2 \chi} e^{2\pi i x n_1} = \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^1} \frac{\cos 2\pi n_1 x}{\pi \lambda_\beta^2 n_1^2 + B}.$$

Le second terme dans le membre de droite de (1.55) est nul parce que la phase implique qu'il est plus petit que la densité de particules dans $\Lambda_{II}^* \setminus \Lambda_{II,0,\Gamma}^*$ qui est nul en limite $\Gamma \rightarrow \infty$.

Pour le cas $\alpha_1 > 1/2$ d'après la définition 1.11 et en vertu de (1.48) nous avons :

$$\begin{aligned}
\sigma_X(\beta, \rho) &= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) + \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{III}^* \setminus \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) \\
&= \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\frac{1}{V^\delta} \frac{1}{V^{2\alpha_1-1}} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-Cj/V^\delta} \right. \\
&\times \sum_{n_1: |n_1/V^{2\alpha_1-1}| \leq \Gamma} e^{-\pi \lambda_\beta^2 (j/V^\delta) (n_1/V^{2\alpha_1-1})^2} e^{2\pi i X_1(V) n_1/V^{\alpha_1}} \left. \right) \\
&+ \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{III}^* \setminus \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right) \tag{1.56}
\end{aligned}$$

où Λ_{III}^* est l'ensemble des modes défini par l'équation (1.43) et $\Lambda_{0,III,\Gamma}^*$ est le sous espace correspondant aux modes condensés défini par (1.44).

Si $\lim_{V \uparrow \infty} (X_1(V)/V^{\delta/2}) = 0$, le premier terme du membre de droite de (1.56) est égal à $\rho_0(\beta, \rho)$ en vertu du théorème 1.6. Etant donné que $\sigma(\beta, \rho) = \rho_0(\beta, \rho)$

(Theorem 1.2) et d'après le lemme 1.3, le second terme de (1.56) est nul et nous obtenons le résultat.

Soit $\lim_{V \uparrow \infty} (X_1(V)/V^{\delta/2}) = x$, $x > 0$, $\delta = 2(1 - \alpha_1)$. Alors la somme sous la limite dans le premier terme de (1.56) est une double somme de Darboux-Riemann, ce qui implique :

$$\int_{\mathbb{R}^+} d\xi e^{-C\xi} \int_{\chi \in \mathbb{R}} d\chi e^{-\pi\lambda_\beta^2 \xi \chi^2} e^{2\pi i x \chi} = \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda_\beta \sqrt{C}} e^{-2x\sqrt{\pi C}/\lambda_\beta}.$$

D'après les mêmes arguments que pour le cas $\alpha_1 = 1/2$, la seconde partie de (1.56) est nulle (la précédente expression est une fonction décroissante de x pour $x > 0$ et ainsi nous obtenons le résultat).

Soit $\lim_{V \uparrow \infty} (X_1(V)/V^{\delta/2}) = \infty$. Comme la fonction de corrélation est décroissante pour $0 < X_\nu \leq V^{\alpha_\nu}/2$ (voir la proposition 1.5), elle est uniformément bornée par l'estimation du dessus avec $X(V) = xV^\delta$, $x > 0$:

$$\int_{\mathbb{R}^+} d\xi e^{-C\xi} \int_{\chi \in \mathbb{R}} d\chi e^{-\pi\lambda_\beta^2 \xi \chi^2} e^{2\pi i x \chi} + \lim_{\Gamma \uparrow \infty} \lim_{V \uparrow \infty} \left(\sum_{k \in \Lambda_{II}^* \setminus \Lambda_{0,III,\Gamma}^*} \rho_\Lambda(k) e^{ik \cdot X(V)} \right).$$

Quand x tend vers l'infini, la première partie tend vers zero (d'après le théorème de Riemann-Lesbegue) donc les précédents arguments montrent que la deuxième partie est nulle aussi. Ceci conclut la preuve. \square

Nous obtenons ainsi une classification des corrélations à longue portée pour les trois cas de boîtes de Casimir :

Theorem 1.8 *Pour un gaz parfait de Bose grand-canonique dans des boîtes de Casimir avec une densité de particules fixe $\rho > \rho_c(\beta)$:*

pour le cas $\alpha < 1/2$ et pour le cas $\alpha_1 = 1/2$ il existe de corrélations macroscopiques dans les trois directions.

pour le cas $\alpha > 1/2$ il existe de corrélations mésoscopiques dans la direction x_1 et macroscopiques dans les deux autres directions.

Preuve : Evidente d'après les définitions 1.12, 1.13 et le théorème 1.7. \square

Il est remarquable que pour les type I et II de condensat généralisé dans les boîtes de Casimir (les cas $\alpha_1 \leq 1/2$) les cohérences spatiales des condensats sont macroscopiques tandis que pour le cas $\alpha_1 > 1/2$ les cohérences spatiales du condensat sont macroscopiques dans deux directions mais mésoscopiques dans la direction la plus anisotrope.

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons introduit un nouveau concept pour étudier la condensation de Bose-Einstein permettant d'adapter l'approche d'échelle de London au problème de la condensation généralisée, de cycles et des corrélations. Elle permet

d'affiner tout d'abord la classification de van den Berg-Lewis-Pulé des condensats en trois types (I, II, III) illustrée pour le cas particulier de la PBG dans des boîtes Casimir. Il s'agit d'une première étape formelle nécessaire avant d'étudier plus attentivement les différents cas de condensation généralisées pour le gaz parfait de Bose dans les boîtes de Casimir, voir la proposition 1.2. L'important de ce premier concept présenté en section 1.2 c'est qu'il permet d'établir un lien entre les différentes terminologies de classifications que l'on trouve dans différents articles [18], [28], [33].

La question fondamentale que nous étudions dans ce chapitre est le lien entre les différents types des g-BEC (I, II, III) avec les cycles longs et les corrélations à longue portée. Nos résultats concernant le PBG dans les boîtes de Casimir peuvent être résumés ici :

- Nous avons introduit la notion de cycles courts/longs à l'échelle afin de distinguer les différents types de condensats généralisés, voir les théorèmes 1.4, 1.5, 1.6, proposition 1.4. La méthode utilisée est l'estimation de la taille des cycles longs dans le condensat, voir les définitions 1.7 à 1.9. Si les cycles longs sont macroscopiques le condensat est de type I ou II, alors que si les cycles longs sont mésoscopiques le condensat est de type III.

- Nous avons introduit la notion de corrélations à longue portée à l'échelle, voir définition 1.11), pour distinguer les différents types de condensats généralisés, voir les théorèmes 1.7, 1.8. Nos arguments sont fondés sur l'estimation de la longueur de cohérence du condensat, voir définitions 1.12, 1.13. Si la longueur de cohérence est macroscopique dans les trois directions, alors le condensat est de type I ou II, et si dans l'une des trois dimensions, la longueur de cohérence est mésoscopique, le condensat est de type III.

Il est clair que les preuves des théorèmes 1.4, 1.5 et 1.6 sont basées sur l'étude des échelles des cycles longs via une analyse des séries géométriques qui se fait sans difficultés. Pour cette raison, nous pouvons dire que l'étude des cycles longs via notre technique d'échelle est adaptée à l'étude de la classification de la condensation généralisée. Une autre raison provient de l'indépendance de la notion de cycles par rapport au choix de représentation de la fonction de partition (Feynman-Kac versus représentation spectrale). Ainsi, cette étude à l'échelle des cycles longs pourrait être utile pour étudier la condensation généralisée pour un gaz de Bose en interaction [34], autrement dit pour déterminer quelle est le type de condensat généralisé, ce qui est un problème actuel important pour les systèmes bi-dimensionnels [33]. Toutefois notons que pour notre cas du gaz parfait, les types I et II ne semblent pas différenciés en connaissant l'échelle de longueur des cycles longs. Cependant il semble plus intéressant de distinguer le type I et II du type III beaucoup plus particulier que les deux premiers d'un point de vu spectral et cohérence spatiale.

Pour simplifier, nous considérons ici un gaz parfait de Bose avec les conditions aux limites périodiques mais nous pourrions adapter les résultats pour les conditions de Dirichlet (chapitres 2 et 4 pour le modèle d'anisotropie exponentielle et quasi-2D) ou de Neumann pour lesquelles nous pouvons caractériser la forme géométrique du nuage de condensation via la notion de densité locale à l'échelle. Dans ces cas, les résultats concernant les hiérarchies de cycles et ODLRO ne changent pas. Toute-

fois, si l'on prend des conditions aux limites attractives, voir [48], on devine que le résultat devrait être différent, puisque dans ce cas le condensat est localisé dans deux modes et il n'est pas homogène. On peut supposer que les cycles longs seraient macroscopiques, mais le plus intéressant serait de calculer la longueur de cohérence du condensat et sa forme géométrique.

Une question se pose naturellement ici, les résultats sont-ils valides pour un gaz imparfait de Bose (en présence d'un champ moyen) ? Comme il a déjà été montré [49], le champ moyen ne change pas (peu importe l'anisotropie géométrie de la boîte) les résultats concernant l'existence d'un condensat généralisé et sa classification. Mais bien entendu concernant les tailles des cycles et des cohérences il n'y a pas de preuves formelles que les résultats ne sont pas modifiés. Tout de même d'un point de vu heuristique, je pense que les résultats ci-dessus ne sont pas modifiés par la présence d'un champ moyen car le terme ajouté à l'Hamiltonien gN^2/V , où g est la paramètre d'interaction, est uniforme dans l'espace des coordonnées et dans l'espace des moments, ce qui ne modifie pas, à priori, la distribution des particules dans chaque mode et par transformé de Fourier la fonction de corrélation reste inchangée elle aussi ; il en est donc de même pour la distribution des particules dans chaque taille de cycle.

La dernière remarque concerne la validité des résultats dans l'ensemble canonique. Il est connu [50] que pour le PBG canonique dans les boîtes de Casimir il existe la même classification de condensats généralisés dans l'ensemble grand-canonique. Ainsi nous pensons que les principales conclusions concernant la hiérarchie des cycles longs et des corrélations à longue portée ne devraient pas être modifiées. Toutefois, étant donné que les densités moyennes de particules dans les différents modes quantiques condensés sont différentes [50] du cas grand-canoniques, nous supposons que des résultats plus fins (formules dans les propositions 1.2 et 1.4 et le théorème 1.7) devraient être différents. De plus la taille maximale des cycles longs est limitée par le nombre de particules total dans le condensat, comme il est montré pour le cas du gaz dans une boîte cubique [51].

Dans les chapitres suivants nous appliquerons cette approche pour l'étude de la localisation du condensat type III (quasi-condensat) et les longueurs de cohérence pour un gaz parfait de Bose dans des boîtes exponentiellement quasi-bidimensionnelles (Ch.2) et dans des pièges harmoniques exponentiellement quasi-uni-dimensionnels (Ch.3). L'approche d'échelle va nous permettre de comprendre que ce sont les échelles caractérisant le condensat généralisé modifiées à partir d'une seconde densité critique ; d'où le nom de *transition d'échelle* au second point critique.

Chapitre 2

La seconde transition de Bose-Einstein pour le gaz de Bose dans une boîte quasi-bi-dimensionnelle

Physics is a human attempt at understanding a certain class of natural phenomena, using scientific methods. We shall not try to define scientific methods in general, but note they have been very successful and very diverse. Mathematical physics is one of these methods or approaches in which a mathematical structure is somehow associated with the structure of physical phenomena. The mathematical structure is then studied by mathematical techniques to yield new statements with physical relevance. Provided it yields physically relevant statement, no mathematical technique is to be judged too sophisticated or too trivial.

D. Ruelle, Statistical Mechanics Rigorous Results, W.A.Benjamin, INC (1969) [52]

2.1 Introduction

Nous pouvons montrer rigoureusement qu'il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein conventionnelle pour un gaz de Bose uni- (1D) et bi-dimensionnel (2D) et les plaques parallèles (films) tri-dimensionnelles. Pour le gaz en interaction, le résultat vient du théorème de Bogoliubov-Hohenberg [31], [32], basé sur les inégalités de Bogoliubov, [53]. Pour le gaz parfait de bosons, le résultat est plus facile à montrer car il vient d'une analyse explicite des densités de particules dans les états quantiques pour une particule. Le point commun avec le cas en interaction est le théorème $1/q^2$ de Bogoliubov [31], [54], qui implique la destruction de l'occupation macroscopique de l'état fondamental par les fluctuations thermiques.

Ce renouvellement d'intérêt pour ce problème d'existence possible du condensat dans les systèmes quasi-bi-dimensionnels (films) vient des récentes données expérimentales indiquant l'existence d'un condensat particulier dit "quasi-condensat" dans les pièges très anisotropes de type quasi-1D [16], [20] et quasi-2D [17] (relié à

la transition BKT). Notons que nous ne pouvons pas relier directement nos prédictions théoriques avec les expériences citées ci-dessus premièrement car la géométrie utilisée est celle du piège harmonique (voir le chapitre 3 pour le cas quasi-1D) car l'effet des interactions est non-négligeable dans les conditions expérimentales, notamment la transition BKT existe uniquement en présence d'interactions [22], [21]. Malgré tout, le travail que nous proposons ici présente une base théorique pour le gaz parfait essentielle pour la poursuite des études du cas en interaction (au minimum pour le cas dilué). De plus, le cas du gaz parfait peut-être approché grâce à une méthode expérimentale liée aux résonances atomiques dite de Feshbach [19]. Remarquons aussi que le cas du gaz de Bose dans un piège harmonique est localement (étude de densités locales au centre du piège) similaire au cas du gaz dans la boîte comme l'ont déjà remarqués les physiciens théoriciens [55] et expérimentateurs [17]. Ainsi le travail exposé dans ce chapitre peut servir de base intuitive pour le gaz piégé quasi-2D, nous le verrons dans la section 2.7.

Dans ce chapitre nous étudions une application du concept d'échelle du chapitre 1 dans l'étude théorique d'un modèle de gaz dans des milieux quasi-bi-dimensionnels. Pour un gaz parfait de Bose dans des boîtes fortement anisotropes dans deux directions (exponentiellement), il existe une seconde densité/température critique $\rho_m(\beta)$ supérieure à la densité critique usuelle $\rho_c(\beta)$ qui sépare deux régimes de condensation différents : le régime de quasi-condensation (condensat généralisé de type III) pour lequel la cohérence est fortement réduite et le régime de condensation usuel sur l'état fondamental (condensat de type I) en coexistence avec le quasi-condensat saturé.

L'existence de cette seconde densité critique notée $\rho_m(\beta)$ pour le gaz parfait a été découverte par M.van den Berg [27] en 1983 et étudiée jusqu'en 1986 [28], [29] ainsi qu'au début des années 1990 [56], [57] pour le modèle de condensation de spin.

L'originalité de notre travail exposé dans ce chapitre à propos de cette seconde densité se résume en 3 points :

- Son interprétation en terme de seconde transition entre deux régimes de condensation comme phénomène de saturation du quasi-condensat et sa coexistence avec un condensat usuel par analogie avec l'interprétation d'Einstein et London de saturation du gaz thermique et sa coexistence avec le condensat, sections 2.2 et 2.3.

- Le rapprochement avec idées physiques existantes reliées à la phénoménologie. Premièrement parce que nous calculons la seconde température critique T_m caractérisée par une température effective τ dépendant du paramètre d'anisotropie exponentielle α et les fractions condensées pour le quasi-condensat et pour le condensat usuel qui se trouve modifiées par rapport au cas usuel, section 2.5. Deuxièmement parce que nous montrons que les résultats s'appliquent au cas du gaz parfait de Bose dans les pièges quasi-2D harmoniques, section 2.7.

- Le décodage de la seconde transition par l'approche d'échelle qui permet de

calculer l'échelle de localisation en impulsion et l'échelle de longueur de cohérence des condensats, section 2.6.

Notons que l'anisotropie exponentielle n'est pas un concept commun pour expériences, nous le discuterons dans la section 2.4 . Ainsi il vient une reformulation de la notion standard de condensation généralisée que nous avons examinée dans le chapitre 1 pour le modèle de boîtes de Casimir et de la version correspondante du théorème de Bogoliubov-Hohenberg [33].

2.2 La seconde densité critique

2.2.1 Première densité critique et condensation généralisée

Rappelons pour commencer l'hamiltonien pour une particule libre dans le gaz parfait de bosons dans une boîte $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$:

$$T_{\Lambda}^{(N=1)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

Dans ce chapitre nous prenons les conditions aux bords de Dirichlet, ainsi les fonctions propres sont :

$$\psi_k(x) = \prod_{\nu=1}^3 \sqrt{\frac{2}{L_j}} \sin(\pi k_{\nu} x_{\nu}),$$

pour chaque *modes* quantiques k dans l'ensemble suivant :

$$\left\{ k = \left(\frac{\pi n_1}{L_1}, \frac{\pi n_2}{L_2}, \frac{\pi n_3}{L_3}, n_{\nu} \in \mathbb{N}^*, \nu = 1, 2, 3 \right) \right\},$$

où les n_{ν} , $\nu = 1, 2, 3$ sont les nombres quantiques entiers strictement positif ($\in \mathbb{N}^*$). Les niveaux d'énergies pour chaque mode k sont donnés par :

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (2.1)$$

On considère le gaz de bosons dans l'ensemble grand-canonique (T, V, μ) où $V = L_1 L_2 L_3$ est le volume de Λ , T la température et μ le potentiel chimique. Le nombre moyen de particule dans chaque état quantique ψ_k pour un mode k est donnée par la distribution de Bose-Einstein :

$$N_k(\beta, \mu) = (e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1)^{-1},$$

où le potentiel chimique :

$$\mu < \inf_k \varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi^2}{L_1^2} + \frac{\pi^2}{L_2^2} + \frac{\pi^2}{L_3^2} \right),$$

pour assurer la convergence et la positivité du nombre de particule $N_k(\beta, \mu)$ pour chaque modes k et le nombre total de particule $N_\Lambda(\beta, \mu) = \sum_k N_k(\beta, \mu)$.

Rappelons le raisonnement vue dans chapitre 1 concernant le processus de saturation du gaz thermique. De manière indépendante de la géométrie, nous obtenons la limite thermodynamique suivante pour la densité totale de particules :

$$\rho(\beta, \mu) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{N_\Lambda(\beta, \mu)}{V} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \mu)} - 1} = \frac{g_{3/2}(e^{\beta\mu})}{\lambda_\beta^3}, \quad (2.2)$$

avec la longueur thermique $\lambda_\beta = \hbar\sqrt{2\pi\beta/m}$ et où $g_p(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^p}$ est la fonction zeta-Riemann généralisée. On constate que comme $\mu < 0$ nous obtenons une limite supérieure pour la densité totale de particule :

$$\rho(\beta, \mu) < \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_\beta^3},$$

où $\zeta(p) = g_p(1)$ est la fonction zeta-Riemann. La signification de cette limite supérieure est donc l'existence d'une densité critique, indépendante de la géométrie :

$$\rho_c(\beta) \equiv \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_\beta^3}.$$

Que se passe t-il pour $\rho > \rho_c(\beta)$? On doit considérer une densité totale de particules fixée ρ . Le potentiel chimique noté $\mu_\Lambda(\beta, \rho)$ est alors l'unique solution de l'équation :

$$\rho = \sum_k \frac{N_k(\beta, \mu)}{V} =: \frac{N_\Lambda(\beta, \mu)}{V} > \rho_c(\beta),$$

cette solution existe et elle est unique car la fonction $N_\Lambda(\beta, \mu)/V$ du potentiel chimique μ est strictement monotone croissante. Ainsi lorsque l'on prend la limite thermodynamique pour la fonction $N_\Lambda(\beta, \mu_\Lambda(\beta, \rho))/V$ on a :

$$\lim_{V \rightarrow \infty} N_\Lambda(\beta, \mu_\Lambda(\beta, \rho))V = \rho > \rho_c(\beta),$$

Comme nous l'avons vu au précédent chapitre, la quantité de surplus de densité $\rho - \rho_c(\beta)$ est égal au condensat généralisé dont la densité est donnée par :

$$\rho_0(\beta, \rho) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{L_1, L_2, L_3 \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| \leq \eta} \rho_\Lambda(k) = \rho - \rho_c(\beta).$$

2.2.2 Modèle d'anisotropie exponentiel quasi-bi-dimensionnel (quasi-2D)

La question qui se pose maintenant c'est quelle est la structure de ce condensat généralisé lorsque l'on prend comme modèle de boîte anisotrope $\Lambda_L = L_1(L) \times$

$L_2(L) \times L_3(L)$, où $L > 0$ est un paramètre de longueur (en mètres) et avec les relations d'échelles de chaque longueurs comme fonction de L :

$$L_1(L) = L_2(L) = Le^{\alpha L}, \quad L_3(L) = L,$$

où $\alpha > 0$ est le *paramètre d'anisotropie exponentielle* de dimension inverse à celle d'une longueur.

Ce type d'anisotropie exponentielle que nous nommons les *boîtes de van den Berg*, modélise une façon de prendre la limite thermodynamique avec des croissances relatives entre les différentes longueurs qui dépendent de L . Usuellement lorsque l'on fait un changement d'échelle pour lequel par exemple L_3 est doublé, alors L_1 est doublé aussi mais L_1/L_3 reste constant. On note alors comme relation $L_1 = \lambda L_3$ où $\lambda > 1$ est le *paramètre d'homothétie*, que l'on nomme conventionnellement le *rapport d'aspect*. Pour notre modèle lorsque $L_3 \mapsto 2L_3$, alors $L_1 \mapsto 2Le^{2\alpha L}$. Deux questions se pose alors tout naturellement :

- Pour un volume fixé, peut-on parler de régime exponentielle pour l'anisotropie ?
- La limite thermodynamique de ce modèle a-t-elle un sens "mathématique" et est-elle équivalente aux limites thermodynamique des autres modèles ?

Nous discuterons dans la section 2.4 ces deux questions .

Revenons maintenant à notre question : quelle est la structure "fine" du condensat généralisé ?

Intuitivement, comme nous avons une anisotropie dans les deux directions x_1, x_2 , nous pouvons penser de manière similaire aux cas vus dans le chapitre 1, que le condensat se répartit dans les modes k_1, k_2 du plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ de l'espace des moments, c'est à dire que les particules condensées possèdent une impulsion dans les deux directions x_1, x_2 du plan $(x_1, x_2, 0)$. Nous allons dans la suite montrer d'où vient ce phénomène par l'analyse de la distribution de Bose-Einstein et par l'étude de l'échelle de décroissance du potentiel chimique vers zero.

2.2.3 Condensat généralisé dans le plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ de l'espace des moments

Exprimons la densité totale de particules $\rho > \rho_c(\beta)$ en séparant la somme sur les modes en une somme sur tous les modes en dedans et en dehors du plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$, en écrivant le potentiel chimique $\mu_L = \mu_L(\beta, \rho) := \inf_k \varepsilon_k - \Delta_L(\beta, \rho)$ où $\Delta_L(\beta, \rho) \geq 0$ est l'unique solution de l'équation $\rho > \rho_c(\beta)$:

$$\rho = \sum_{k=(k_1, k_2, \pi/L_3)} \frac{N_k(\beta, \mu_L)}{V_L} + \sum_{k \neq (k_1, k_2, \pi/L_3)} \frac{N_k(\beta, \mu_L)}{V_L}. \quad (2.3)$$

Tout d'abord, si on suppose que la fonction $\Delta_L = \Delta_L(\beta, \rho) \ll \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_3^2}$, alors la somme en dehors du plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ est saturée à la valeur de la densité critique

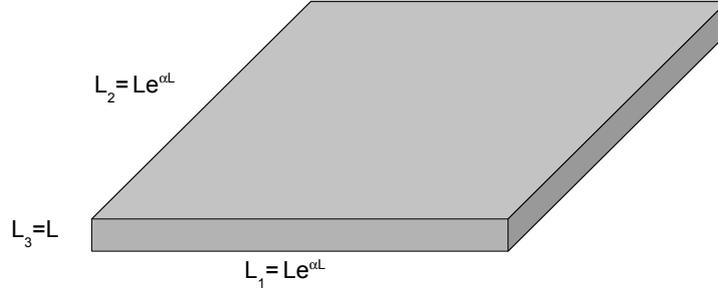


FIG. 2.1 – Shéma illustrant le système de confinement quasi-2D dans une boîte exponentiellement anisotrope

car elle peut s'écrire comme une somme de Riemann et tendre vers l'intégrale (2.2) en prenant $\mu = 0$:

$$\begin{aligned}
 & \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{k \neq (k_1, k_2, \pi/L_3)} N_k(\beta, \mu_L) / V_L \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n_1 \geq 0, n_2 \geq 0, n_3 \geq 1} \frac{1}{V_L} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi^2 n_1^2}{L_1^2} + \frac{\pi^2 n_2^2}{L_2^2} + \frac{\pi^2 n_3^2}{L_3^2}) + \Delta_L)} - 1} \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m)} - 1} = \rho_c(\beta)
 \end{aligned}$$

Ensuite calculons la densité de particules dans le plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ noté $\rho_{qbec}(\beta, \rho)$ qui doit être égal à la densité du condensat généralisé $\rho - \rho_c(\beta)$:

$$\begin{aligned}
 \rho_{qbec}(\beta, \rho) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{k=(k_1, k_2, \pi/L_3)} \frac{N_k(\beta, \mu_L)}{V_L} \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n_1 \geq 0, n_2 \geq 0} \frac{1}{V_L} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi^2 n_1^2}{L_1^2} + \frac{\pi^2 n_2^2}{L_2^2}) + \Delta_L)} - 1} \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2 k}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m + \Delta_L(\beta, \rho))} - 1} \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} -\frac{1}{\lambda_\beta^2 L} \ln[\beta \Delta_L(\beta, \rho)] \\
 &= \rho - \rho_c(\beta),
 \end{aligned}$$

ce qui implique pour la fonction $\Delta_L(\beta, \rho)$ l'asymptotique suivante :

$$\Delta_L(\beta, \rho) = \frac{1}{\beta} e^{-\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta))L + o(L)} \quad (2.4)$$

qui décroît vers zero avec une vitesse très grande devant $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L_3^2}$ pour $\rho > \rho_c(\beta)$.

2.2.4 Saturation du condensat généralisé sur le plan dans l'espace des moments et condensat conventionnel dans le mode fondamental

Remarquons d'après l'équation (2.4) que pour certaines valeurs de densités, la fonction $\Delta_L(\beta, \rho)$ est très grande devant l'échelle de distance entre les niveaux d'énergie $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L_{1,2}^2}$ dans le plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ car $L_1 = L_2 = Le^{\alpha L}$, $L_3 = L$. Ainsi l'exposant $\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta))$ pour la loi de décroissance de la fonction $\Delta_L(\beta, \rho)$ doit être limité par la valeur 2α , car si cet exposant est plus grand que cette valeur critique, la fonction $\Delta_L = \beta^{-1} e^{-2\alpha'}$, $\alpha' > \alpha$ décroît plus vite que l'inverse du volume $V_L^{-1} = L^{-3} e^{-2\alpha L}$ et donc la densité de particule dans l'état fondamental est infinie :

$$\frac{N_{\text{inf}(k)}}{V_L} = \frac{1}{V_L} \frac{1}{e^{\beta\Delta_L} - 1} \simeq \frac{1}{V_L \Delta_L} = \frac{e^{2(\alpha' - \alpha)L}}{L^3} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \infty.$$

Ainsi nous obtenons une borne supérieur pour la densité de particules de sorte que que $\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta)) < 2\alpha$:

$$\rho < \rho_c(\beta) + \frac{2\alpha}{\lambda_\beta^2},$$

et avons donc l'existence d'une seconde densité critique notée $\rho_m(\beta)$:

$$\rho_m(\beta) \equiv \rho_c(\beta) + \frac{2\alpha}{\lambda_\beta^2}, \quad (2.5)$$

à partir de laquelle la loi d'échelle de décroissance du potentiel chimique doit changer.

Que se passe t-il lorsque $\rho > \rho_m(\beta)$?

De manière similaire au premier processus de condensation pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$, la fonction $\Delta_L(\beta, \rho > \rho_m)$ est l'unique solution de l'équation

$$\rho = N_L(\beta, \mu_L(\beta, \rho))/V_L > \rho_m(\beta),$$

avec $\mu_L(\beta, \rho) = \inf_k \varepsilon(k) - \Delta_L(\beta, \rho)$. Dans ce cas nous retrouvons le même raisonnement que pour le cas cubique, mais pour $\rho > \rho_m(\beta)$, à savoir que $\Delta_L(\beta, \rho) = [\beta(\rho - \rho_m(\beta))V_L]^{-1}$ ce qui implique l'occupation macroscopique du mode fondamental. Que se passe-t-il pour le condensat dans le plan $(k_1 > \pi/L_1, k_2 > \pi/L_2, \pi/L_3)$

(sans le mode fondamental) noté $\rho_{qbec}(\beta, \rho > \rho_m)$? Comme $V_L = L^3 e^{2\alpha L}$, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \rho_{qbec}(\beta, \rho > \rho_m) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{k=(k_1 > \pi/L_1, k_2 > \pi/L_2, \pi/L_3)} \frac{N_s(\beta, \mu)}{V_L} \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n_1 \geq 1, n_2 \geq 1} \frac{1}{V_L} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi^2 n_1^2}{L_1^2} + \frac{\pi^2 n_2^2}{L_2^2}) + \Delta_L)} - 1} \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} -\frac{1}{\lambda_\beta^2 L} \ln[\beta \Delta_L(\beta, \rho > \rho_m)] \\
 &= 2\alpha / \lambda_\beta^2 \\
 &= \rho_m(\beta) - \rho_c(\beta),
 \end{aligned}$$

et nous avons donc une densité dans ce condensat noté $\rho_{qbec}(\beta, \rho)$ qui sature :

$$\rho_{qbec}(\beta, \rho > \rho_m) = \rho_m(\beta) - \rho_c(\beta) = \frac{2\alpha}{\lambda_\beta^2}. \quad (2.6)$$

et la densité de particules dans le mode fondamental, notée $\rho_{bec}(\beta, \rho)$ est positive :

$$\rho_{bec}(\beta, \rho) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{V_L} \frac{1}{e^{\beta(\Delta_L(\beta, \rho))} - 1} = \rho - \rho_m(\beta). \quad (2.7)$$

Notons que pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$ nous avons un condensat généralisé de type III i.e. *aucun* modes n'est *macroscopiquement* occupé, car d'après (2.1) et (2.4) pour tout k on a :

$$\rho_k(\beta, \rho) := \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{V_L} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu_L(\beta, \rho))} - 1} = 0. \quad (2.8)$$

De même, pour l'asymptotique $\Delta_L(\beta, \rho > \rho_m(\beta)) = [\beta(\rho - \rho_m(\beta))V_L]^{-1}$, on a pour tout les modes $k \neq (\pi/L_1, \pi/L_2, \pi/L_3)$:

$$\rho_k(\beta, \rho) := \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{V_L} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu_L(\beta, \rho))} - 1} = 0, \quad (2.9)$$

i.e. pour $\rho > \rho_m(\beta)$ il y a *coexistence* du condensat généralisé de type III *saturé* avec une densité constante (2.6), et du condensat standard (i.e. un condensat généralisé de *type* I) sur le mode fondamental (2.7), voir les figures 2.2 et 2.3.

2.2.5 Quelle est la nature du condensat généralisé dans le plan ?

En 1983, van den Berg a découvert que le condensat généralisé que l'on obtient est de type III, dans la classification van den Berg, Lewis, Pulé. C'est à dire qu'aucun mode n'est macroscopiquement occupé quand bien même nous obtenons un condensat généralisé. La question qui c'est posée dans la thèse pour ce type de condensat était : quelle est le lien entre un condensat de type III et les différentes terminologies

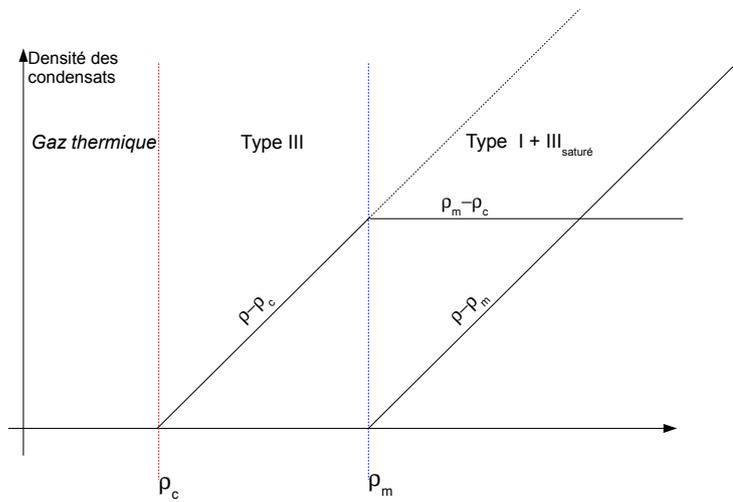


FIG. 2.2 – Shéma illustrant les croissances de densité du quasi-condensat et condensat. la courbe noir en pointillé représente la somme des deux densités condensées après la seconde densité critique

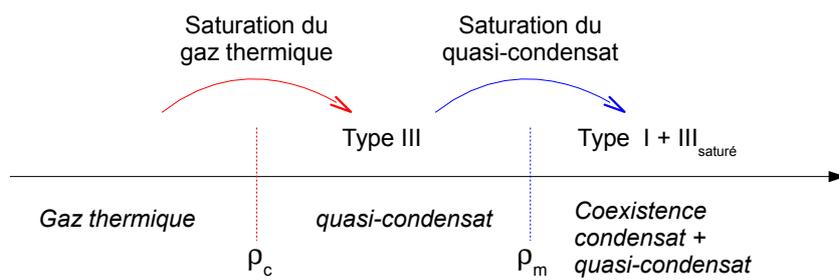


FIG. 2.3 – Shéma des deux processus de transitions

de condensats en phénoménologie ? Nous avons dans le chapitre 1 répondu à cette question en expliquant que pour chaque type de condensat de van den Berg, Lewis et Pulé nous avons une correspondance avec les terminologie condensat usuel (I), fragmenté (I,II) et quasi-condensat (III).

Pour l'étude du phénomène de seconde transition et son rapprochement avec les observations expérimentales récentes [16], [17], nous allons utiliser la terminologie de quasi-condensat pour un condensat généralisé de type III. Il est important de préciser que l'on peut mesurer avec des méthodes de diffusion de Bragg la distribution en impulsion du condensat et le nombre de particules condensées dans chaque mode [16]. Nous verrons dans la section suivante l'échelle de localisation du condensat, ainsi calculons l'échelle de grandeur du nombre de particules dans chaque état condensé, pour les modes du plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ avec $k_\nu = \pi(n_\nu + 1)/L_\nu$, $\nu = 1, 2$ avec $n_\nu \in \mathbb{N}$ pour $\rho < \rho_m(\beta)$ et $n_\nu \in \mathbb{N}^*$ pour $\rho > \rho_m(\beta)$.

(i) Régime $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$

Nous avons vu que la fonction $\Delta_L(\beta, \rho)$ décroît moins vite que $1/L_1^2$ (on va y revenir plus en détails dans le prochain paragraphe), on trouve alors :

$$\begin{aligned} N_{(k_1, k_2, \pi/L_3)} &= \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n_1^2}{L_1^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n_2^2}{L_2^2} + \Delta_L(\beta, \rho))} - 1} \\ &= O\left(\frac{1}{\beta \Delta_L}\right) = O(e^{\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta))L}), \end{aligned}$$

comme $\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta))L < 2\alpha$, le nombre de particules est *mésoscopique*.

Ainsi le condensat est réparti sur un ensemble de modes mésoscopiquement occupé, c'est donc un quasi-condensat ou condensat généralisé de type III, voir les figures 2.2 et 2.3.

(ii) Régime $\rho > \rho_m(\beta)$

Cette fois la fonction $\Delta_L(\beta, \rho)$ décroît plus vite que $1/L_1^2$ puisqu'elle décroît en $1/V_L$, on calcule alors pour les modes du plan avec une certaine échelle de localisation que nous allons étudier dans la section 2.3. Heuristiquement la localisation des niveaux quasi-condensés pour $\rho > \rho_m(\beta)$ se trouve en prenant la valeur de la fonction $\Delta_L(\beta, \rho = \rho_m(\beta))$ ce qui donne :

$$\begin{aligned} N_{(k_1, k_2, \pi/L_3)} &= O\left(\frac{1}{e^{\beta(\Delta_L(\beta, \rho = \rho_m(\beta)))} - 1}\right) \\ &= O\left(\frac{1}{\beta \Delta_L(\beta, \rho = \rho_m(\beta))}\right) = O(e^{2\alpha L}), \end{aligned}$$

nous avons donc aussi un quasi-condensat ou condensat généralisé de type III saturé (qui ne dépend pas de la densité), voir les figures 2.2 et 2.3.

2.3 Nature de la seconde transition

2.3.1 Echelle de localisation en impulsion du quasi-condensat

Nous avons expliqué que pour $\rho > \rho_c(\beta)$, le quasi-condensat est réparti sur deux axes dans l'espace des moments et nous avons écrit cette somme comme une somme de Darboux-Riemann qui en limite thermodynamique, c'est à dire quand le volume est infini, tend vers une intégrale sur \mathbb{R}^2 dans le plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$. Mais une question se pose, quelle est l'origine plus précise de cette intégrale, autrement dit quelle est la localisation en impulsion, dans l'espace des moments, du quasi-condensat ?

Approche du condensat à l'échelle pour $\rho_c < \rho < \rho_m$

Pour répondre à cette question, nous allons nous servir du concept d'échelle développé dans le chapitre 1 concernant la structure énergétique du condensat généralisé. Nous avons vu dans ce chapitre 1 que nous pouvons définir le condensat comme une somme de densités de particules dans un ensemble de modes k dont la norme, relié à l'énergie dans ces modes $\|k\| = \sqrt{2m\varepsilon_k/\hbar^2}$, est inférieur à une certaine échelle $\eta(L)$ (nous écrivons ici le paramètre L pour notre modèle car le volume V_L dépend de L) qui tend vers zero quand L tend vers l'infini, i.e. en limite thermodynamique. Autrement dit, nous faisons la somme sur les niveaux d'énergies compris à l'intérieur d'une bande d'énergie de taille $\hbar^2\eta(L)^2/2m$. Pour le quasi-condensat dans les boîtes quasi-2D exponentielle, nous pouvons écrire :

$$\rho_{qbec}(\beta, \rho) = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| \leq \eta(L)} \rho_L(k), \quad (2.10)$$

avec un choix judicieux de fonction $\eta(L)$ peut nous permettre de trouver le domaine d'impulsion contenant le condensat ; par exemple, pour une densité de particules fixée ρ , choisissons $\eta(L) = \sqrt{2m\Delta_L(\beta, \rho')/\hbar^2}$, avec $\rho_c(\beta) < \rho' < \rho$ et donc $\Delta_L(\beta, \rho') \gg \Delta_L(\beta, \rho)$ car je le rappelle, le potentiel chimique effectif $\Delta_L(\beta, \rho) = \beta^{-1}e^{\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta))L}$ est une fonction décroissante de ρ . Avec ce choix de fonction $\eta(L)$, nous pouvons calculer la densité quasi-condensée :

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| \leq \eta(L)} \rho_L(k) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{V_L} \sum_{\|k\|: k^2 \leq 2m\Delta_L(\beta, \rho')/\hbar^2} \frac{1}{e^{\beta(\hbar^2 k^2/2m + \Delta_L(\beta, \rho))} - 1} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\Delta_L(\beta, \rho)} \frac{1}{L_1} \sum_{n_1: \pi n_1/L_1 \leq \eta(L)} e^{-j\beta\pi^2 \frac{n_1^2}{L_1^2}} \\ &\times \frac{1}{L_2} \sum_{n_2: \pi n_2/L_2 \leq \eta(L)} e^{-j\beta\pi^2 \frac{n_2^2}{L_1^2}}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

la dernière partie de l'égalité étant obtenue par développement en série de la distribution de Bose-Einstein. Nous introduisons l'échelle $j\Delta_L(\beta, \rho)$ dans les sommes,

de sorte à obtenir une échelle de saut entre deux modes successifs (de n_ν à $n_\nu + 1$, $\nu = 1, 2$) de l'ordre de $(L_\nu \Delta_L(\beta, \rho))^{-1}$:

$$\begin{aligned}
 \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| \leq \eta(L)} \rho_L(k) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\Delta_L(\beta, \rho)}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta \Delta_L(\beta, \rho)} \frac{1}{\sqrt{\Delta_L(\beta, \rho)} L_1} \\
 &\times \sum_{n_1: \pi n_1 / L_1 \leq \eta(L)} e^{-j\Delta_L(\beta, \rho) \beta \pi^2 \frac{n_1^2}{(L_1 \sqrt{\Delta_L(\beta, \rho)})^2}} \frac{1}{\sqrt{\Delta_L(\beta, \rho)} L_2} \\
 &\times \sum_{n_2: \pi n_2 / L_2 \leq \eta(L)} e^{-j\Delta_L(\beta, \rho) \beta \pi^2 \frac{n_2^2}{(L_1 \sqrt{\Delta_L(\beta, \rho)})^2}}, \quad (2.12)
 \end{aligned}$$

ainsi nous obtenons deux sommes de Darboux-Riemann sur les modes k_1 , k_2 , les avec les incréments $\frac{1}{L_\nu \Delta_L(\beta, \rho)}$, $\nu = 1, 2$, l'intégrale variant de 0 à l'infini car $\eta(L) \gg \sqrt{2m\Delta_L(\beta, \rho)/\hbar^2}$:

$$\begin{aligned}
 \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| \leq \eta(L)} \rho_L(k) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\Delta_L(\beta, \rho)}{L} \sum_{j=0}^{\infty} e^{j\beta \Delta_L(\beta, \rho)} \\
 &\times \int_0^\infty \frac{dk_1}{(2\pi)} e^{j\beta \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_L(\beta, \rho)} \int_0^\infty \frac{dk_2}{(2\pi)} e^{j\beta \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_L(\beta, \rho)} \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j\lambda_\beta^2} e^{j\beta \Delta_L(\beta, \rho)} \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} -\frac{1}{\lambda_\beta^2 L} \ln[1 - e^{\beta \Delta_L(\beta, \rho)}] = \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} -\frac{1}{\lambda_\beta^2 L} \ln[\beta \Delta_L(\beta, \rho)] \\
 &= \rho - \rho_c(\beta) = \rho_{qbec}(\beta), \quad (2.13)
 \end{aligned}$$

et nous avons donc trouvé la densité du quasi-condensat.

Nous aurions pu choisir une fonction $\eta'(L) \ll \sqrt{2m\Delta_L(\beta, \rho)/\hbar^2} \ll \eta(L)$ comme limite inférieure pour la somme calculée pour obtenir une localisation plus fine du quasi-condensat, par exemple, si nous avons choisi $\eta'(L) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} e^{\lambda^2(\rho - \rho'')}}$, $\rho'' > \rho$, alors l'équation (2.11) modifiée en ajoutant une borne inférieure dans les bornes la somme serait restée valide.

Commentons d'un point de vue heuristique ce résultat :

L'idée est de sommer sur les niveaux d'énergie $\hbar^2 \|k\|^2 / 2m \leq \Delta_L(\beta, \rho)$ et donc sur les modes k tel que $\|k\| \simeq \sqrt{2m\Delta_L(\beta, \rho)/\hbar^2} \equiv k_c(L)$, ce qui exclu les modes sur l'axe k_3 dans l'espace des moments car $\inf(k_3) = 2\pi/L \gg k_c(L)$. Pour les deux autres dimensions k_1 , k_2 , nous obtenons ainsi une somme sur les entiers n_ν , $\nu = 1, 2$ tel que $n_\nu \simeq \sqrt{2m\Delta_L(\beta, \rho)/\pi^2 \hbar^2} L_1 \equiv n_c(L)$ (car $L_1 = L_2$), et comme $\Delta_L(\beta, \rho) L_1$

tend vers zero quand L tend vers l'infini, cela signifie que nous sommes sur des entiers qui tendent vers l'infini quand L tend vers l'infini mais que les modes k_1, k_2 tendent vers zero. On obtient donc une intégrale sur des modes avec une échelle défini par $k_c(L)$. Si on somme sur tous les modes $k_\nu \leq k'_c(L) = \sqrt{2m\Delta_L(\beta, \rho')/\hbar^2}$, avec $\rho_c(\beta) < \rho' < \rho$, et donc $k'_c(L) \gg k_c(L)$, alors notre intégrale sur les modes dans les directions k_1, k_2 , à l'échelle $k'_c(L)$ se fait sur un domaine de zero à l'infini et nous obtenons ainsi une divergence logarithmique régularisée par le facteur $1/L$ devant l'intégrale.

Remarquons que nous avons dû développer la distribution de Bose-Einstein en série géométrique pour introduire l'échelle en question. Cette série géométrique, sur l'indice j , peut-être interprétée comme une somme sur les cycles de bosons de longueur j , comme nous l'avons étudié dans le chapitre 1. Cela n'est pas anodin, le passage par l'étude des cycles longs nous permet d'introduire l'échelle de localisation des modes condensées. Notons que la taille des cycles longs formés pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$ est mésoscopique et de l'ordre de $1/\Delta_L(\beta, \rho)$. Nous reviendrons sur cette représentation du gaz de Bose dans le chapitre 4.

Echelle de localisation

Pour affiner notre précédente démonstration et obtenir un résultat plus fin, nous allons réduire la somme (2.10) sur une "couronne" dans l'espace des phase à l'échelle $k_c(L) = \lambda e^{-\frac{\lambda}{2}(\rho - \rho_c(\beta))L}$ que nous avons trouvée pour $\rho < \rho_m(\beta)$. Prenons l'ensemble $k : ak_c(L) \leq \|k\| \leq bk_c(L)$, où a et b sont deux nombres réel strictement positifs. Maintenant calculons la densité de particules dans cette "couronne", en reprenant le même raisonnement que précédemment avec les équations (2.11), (2.12), (2.13), mais en changeant les bornes de la somme :

$$\begin{aligned}
 & \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{ak_c(L) \leq \|k\| \leq bk_c(L)} \rho_L(k) = \\
 = & \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\Delta_L(\beta, \rho)}{L} \sum_{j=0}^{\infty} e^{j\beta\Delta_L(\beta, \rho)} \int_a^b \frac{dk_1}{(2\pi)} e^{j\beta\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_L(\beta, \rho)} \int_a^b \frac{dk_2}{(2\pi)} e^{j\beta\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_L(\beta, \rho)} \\
 = & \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j\lambda_\beta^2} e^{j\beta\Delta_L(\beta, \rho)} (\text{erf}(b) - \text{erf}(a)) \\
 = & \rho_{qbec}(\beta, \rho) (\text{erf}(b) - \text{erf}(a)) \xrightarrow{a \rightarrow 0, b \rightarrow \infty} \rho_{qbec}(\beta, \rho), \tag{2.14}
 \end{aligned}$$

où $\text{erf}(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^x dx' e^{-x'^2}$, $x \in \mathbb{R}^1$ est la fonction d'erreur de Gauss.

Ainsi nous avons trouvée l'échelle de localisation en impulsion $k_c(L)$ du quasi-condensat pour le premier régime de condensation (voir figure 2.4) :

$$k_c(L) = \frac{2m}{\hbar^2} e^{-\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c)L/2}, \quad \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta). \tag{2.15}$$

Nous pouvons étendre notre raisonnement au cas $\rho > \rho_m(\beta)$ pour la densité quasi-condensée, on trouve avec les mêmes arguments que la localisation en impul-

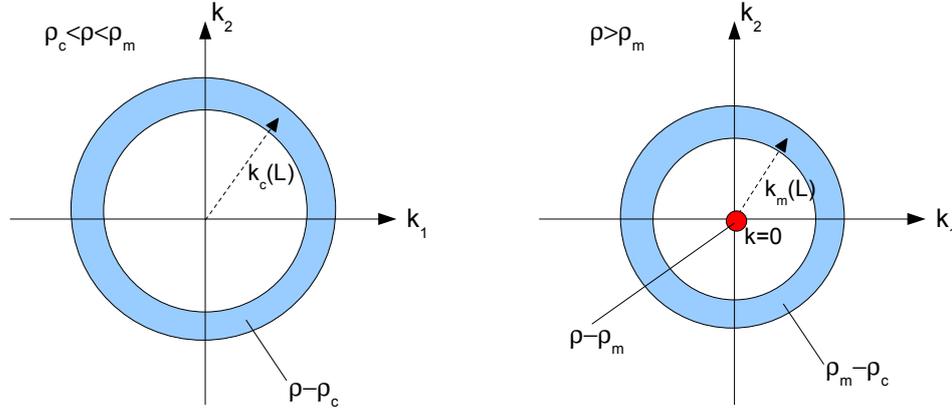


FIG. 2.4 – Illustration des condensats à l'échelle dans l'espace des moments, voir équation (2.16)

sion notée $k_m(L)$ est donnée par $k_m(L) = \frac{2m}{\hbar^2} e^{-\lambda_\beta^2(\rho_m(\beta) - \rho_c)L/2}$, précisément égale à $k_c(L)$ pour $\rho = \rho_m(\beta)$. Ce qui donne d'après (2.14) $k_m(L) = \frac{2m}{\hbar^2} e^{-\alpha L} \gg 1/L_1 = \frac{1}{L} e^{-\alpha L}$, avec $\Delta_L(\beta, \rho > \rho_m(\beta)) = \beta^{-1}/((\rho - \rho_m(\beta))V_L)$, voir la figure 2.4. Il est à noter que pour $\rho > \rho_m(\beta)$, l'échelle de localisation ne va pas varier car le paramètre de décroissance dans l'exponentielle qui est α est le plus petit paramètre possible permettant d'assurer la représentation sous forme intégrale de la densité de particules quasi-condensée sur le plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ de l'espace des moments. Ainsi nous obtenons la densité quasi-condensée en modifiant l'équation (2.14), voir figure 2.4 :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{ak_c(L) \leq \|k\| \leq bk_c(L)} \rho_L(k) \xrightarrow{a \rightarrow 0, b \rightarrow \infty} \rho_m(\beta) - \rho_c(\beta). \quad (2.16)$$

2.3.2 Interprétation et définition de la seconde transition

En définitive, nous avons amélioré la définition de "condensation à l'échelle" du chapitre 1 que nous pouvons formuler de manière analogue à la définition du condensat généralisé avec deux limites successives mais avec comme différences le

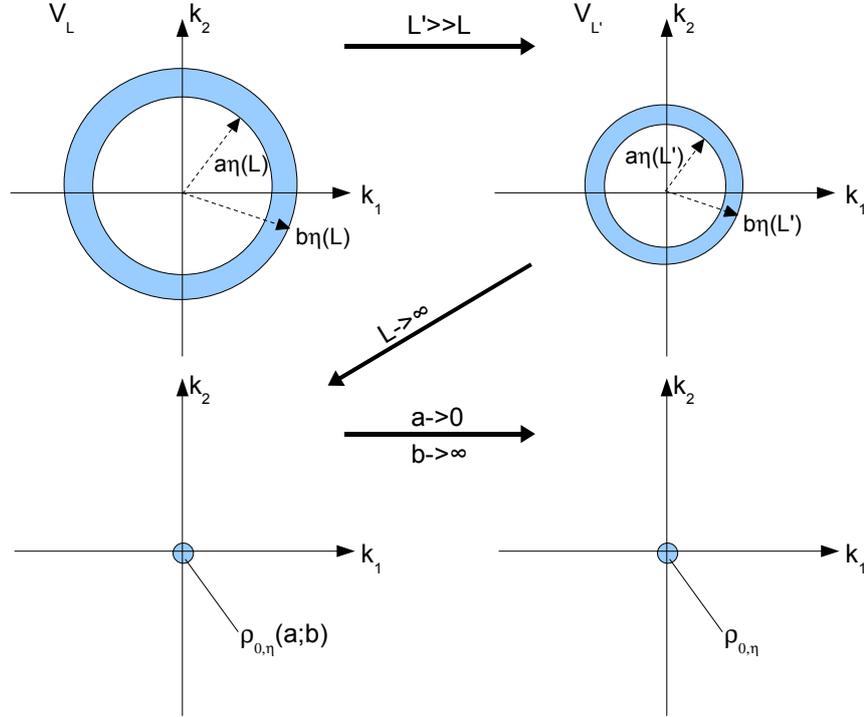


FIG. 2.5 – Illustration du processus de captation d'un condensat localisé à l'échelle dans l'espace des moments, voir définition 2.1

choix d'une échelle qui définit une "couronne" d'énergie qui tend vers zero en limite thermodynamique.

Ainsi la densité de particule dans un *condensat localisée en impulsion à une échelle $\eta(L)$* est défini par (voir la figure 2.5) :

Définition 2.1 Pour un gaz de Bose dans une boîte parallélépipédique Λ_L , avec une densité de particules fixe ρ , il existe un condensat localisé en impulsion à l'échelle $\eta(L)$ si

$$\rho_{0,\eta}(\beta, \rho) := \lim_{a \rightarrow 0, b \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{a\eta(L) \leq \|k\| \leq b\eta(L)} \rho_L(k) > 0$$

Si pour une densité donnée ρ , le condensat généralisé s'obtient comme la somme de condensats localisés en impulsion à des échelles différentes $\eta_i(L)$, on dit que plusieurs condensats localisés coexistent :

$$\rho_0(\beta, \rho) = \sum_i \rho_{0,\eta_i}(\beta, \rho)$$

Cette nouvelle définition 2.1 permet de prendre en compte tous les cas possibles de condensations généralisées y compris les régimes de coexistences possibles. Pour

notre modèle, nous avons ainsi deux régimes : quasi-condensation (ou condensat type III) et coexistence quasi-condensation (ou condensat type III) et condensation usuelle (ou condensat type I sur le mode fondamental) :

Theorème 2.1 *Pour un gaz parfait de Bose dans des boîtes parallélépipédiques exponentiellement anisotropes quasi-bi-dimensionnelles $\Lambda_L = Le^{\alpha L} \times Le^{\alpha L} \times L$, $\alpha > 0$, pour une densité de particules fixe $\rho > \rho_c(\beta)$, il existe :*

- pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$: un condensat (quasi-condensat ou généralisé de type III) localisé en impulsion à l'échelle $k_c(L) = \lambda_\beta^{-1} e^{-\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c)L/2}$,
- pour $\rho > \rho_m(\beta)$: une coexistence entre deux condensats (quasi-condensat ou généralisé de type III, localisé en impulsion à l'échelle $k_m(L) = \lambda_\beta^{-1} e^{-\alpha L}$, plus un condensat usuel ou généralisé de type I sur le mode fondamental).

Preuve : La preuve est évidente d'après l'ensemble de nos résultats des sections 2.2 et 2.3 \square

Avec la définition 2.1, et nos précédents arguments, nous avons donc montré que le quasi-condensat est localisé en impulsion à une certaine échelle $k_c(L)$ décroissante en densité pour $\rho < \rho_m(\beta)$ et $k_m(L)$ constante pour $\rho > \rho_m(\beta)$, résultat énoncé dans le théorème 2.1. On observe donc une transition pour la loi d'échelle donnant la localisation du quasi-condensat. L'exposant dans la loi de décroissance exponentielle de l'échelle de localisation, qui se trouve être $\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta))/2$ avant et α après la seconde densité critique est continue mais n'est pas dérivable au *point critique* $\rho = \rho_m(\beta)$. Notons que notre seconde transition n'est pas une transition de phase [11] car les fonctions thermodynamiques (dérivées successives de l'énergie libre par rapport à la température ou à la densité) ne sont pas modifiées lors du changement de régime de condensats généralisé au point critique $\rho = \rho_m(\beta)$, étant donnée la faible contribution énergétique des condensats. Par contre étant donnée que l'échelle de localisation en impulsion est modifiée de manière non-dérivable, je propose la terminologie suivante pour nommer cette transition : une *transition d'échelle*, en l'occurrence pour ce cas *de rang 1* car l'exposant dans la loi d'échelle n'est pas dérivable. Nous reviendrons dans la section 2.6 sur le point de vue spatiale associée à localisation en impulsion avec la notion de *rayon de corrélation* et *longueur de cohérence*.

2.4 Discussion sur le modèle d'anisotropie exponentielle

A volume fini V_L , pour le modèle d'anisotropie usuel on considère que $L_1 = L_2 = \lambda L$, $L_3 = L$ avec $L \gg n^{-1/3}$ (pour être dans le régime thermodynamique). Pour $\rho > \rho_c(\beta)$ le potentiel chimique est solution de $\rho = N/V_L$, noté $\mu_L = \varepsilon_{(1,1,1)} - \Delta_L(\beta)$. Si l'anisotropie est très grande, $\lambda \gg 1$, nous pouvons calculer la densité de particules dans les niveaux d'énergie de l'ordre de $1/\sqrt{\Delta_L(\beta)}$ distribué dans le plan $(k_1, k_2, 0)$

car on a $k_3 \gg \sqrt{2m\Delta/\hbar^2}$:

$$\begin{aligned} \rho_{qbec}(\beta) &\equiv \frac{1}{L_1 L_2 L_3} \sum_{\|k\|=O(\sqrt{\frac{2m\Delta_L}{\hbar^2}})} N_L(k) \simeq \frac{1}{L_3} \int_{\mathbb{R}^2} d^2k \frac{1}{e^{\beta(\hbar^2 k^2/2m + \beta^{-1}\Delta_L)} - 1} \\ &= \frac{-1}{\lambda_\beta^2 L} \ln(\Delta_L) = (N - N_c(\beta))/V_L = \rho - \rho_c(\beta) \end{aligned} \quad (2.17)$$

on trouve que $\Delta_L \simeq e^{-\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta))L}$. On trouve donc un condensat non-conventionnel composé de $\beta\Delta_L$ nombre de modes mésoscopiquement occupés ($N_L(k) \simeq 1/(\beta\Delta_L) \ll N$).

Cependant nous avons une condition de validité pour la représentation (2.17) : $\hbar^2 \inf(k_{1,2})/2m$ doit être plus petit que $\Delta_L(\beta, \rho)$ et donc sachant que $\lambda \gg 1$, nous devons avoir :

$$\frac{1}{\lambda} \ll \sqrt{\beta\Delta_L(\beta, \rho)},$$

et donc $(N - N_c(\beta))/L_1 L_2 < 2 \ln(\lambda)/\lambda_\beta^2$. Par conséquent, nous trouvons une densité critique : $\rho_m(\beta) = \rho_c(\beta) + \ln(\lambda)/\lambda_\beta^2 L$, limitant l'augmentation de la densité de particules dans le condensat sur le plan. Le second nombre critique de particules est alors $N_m(\beta) = n_m(\beta)V_L$. Ainsi quand $\rho > \rho_m(\beta)$ le potentiel chimique prend la forme usuelle $\mu_L = \varepsilon_{(1,1,1)} - 1/(\beta(N - N_m))$ et le condensat standard sur le mode fondamental apparaît $N_{bec} = N - N_m(\beta)$ et le condensat sur le plan sature $N_{qbec}(\beta) = N_m(\beta) - N_c(\beta)$.

Nous pouvons faire trois remarques importantes :

(i) Pour un volume fini, la différence entre les deux densités critiques est donnée par $2 \ln(\lambda)/\lambda_\beta^2 L$. Ainsi la seconde transition peut-être expérimentalement visible si cet écart entre les deux transitions est numériquement comparable à la première densité critique $\rho_c(\beta) = \zeta(3/2)/\lambda_\beta^3$. Alors pour des paramètres expérimentaux donnés (L_1, L_2, L_3, T, m), nous pouvons calculer numériquement la seconde densité critique $\rho_m(\beta)$ (ou le second nombre critique $N_m(\beta)$) prédite par le modèle et la comparer avec la valeur de $\rho_c(\beta)$ (ou $N_c(\beta)$) prédite par le modèle standard. Heuristiquement, nous devons avoir $\ln(\lambda) \sim L\rho^{1/3} \Leftrightarrow \lambda \sim e^{L\rho^{1/3}}$. Si on pose $\ln(\lambda) = \alpha L$, $\alpha > 0$ avec $\alpha = O(\rho^{1/3})$, nous justifions l'introduction du modèle d'anisotropie exponentiel $\lambda = e^{\alpha L}$.

(ii) De plus, pour formuler une théorie pour la seconde transition en limite thermodynamique, nous devons choisir un modèle d'anisotropie de boîte pour lequel la seconde densité existe, ainsi nous devons avoir une relation d'échelle pour le rapport d'aspect $\lambda = e^{\alpha L}$, où $\alpha > 0$ est le paramètre d'anisotropie exponentielle.

Notons que si l'idée d'obtention de résultats différents en limite thermodynamique, pour différents modèles géométriques peut sembler difficile à accepter, mathématiquement la notion de limite vers l'infini pour le modèle d'anisotropie exponentiel est bien défini au sens de van Hove, même si il ne satisfait pas la limite au

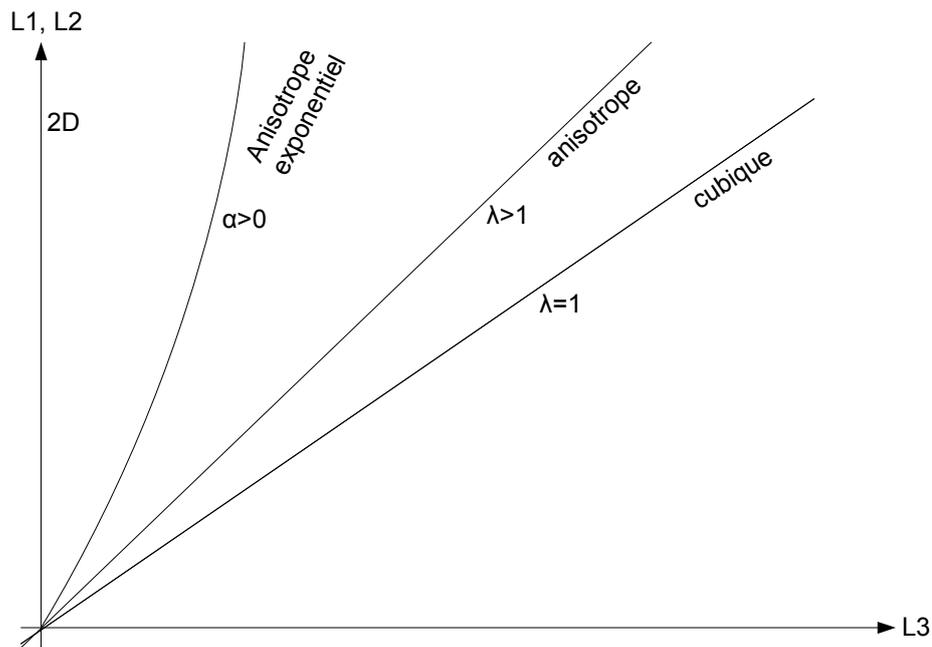


FIG. 2.6 – Illustration des différentes physiques en limite thermodynamique entre les différents modèles anisotropes (linéaire, exponentiel et bi-dimensionnel) pour le gaz parfait. Insistons sur les différences fondamentales entre ces trois régimes. Pour cas d’anisotropie linéaire il n’existe qu’une seule densité critique indépendante de λ qui distingue le régime non-condensé du régime condensé sur le fondamental. Pour le cas exponentiellement anisotrope la première densité critique existe et est inchangée mais il existe une seconde densité critique dépendante de α marquant l’appartition d’un condensat sur le fondamental. Pour le cas bi-dimensionnel, il n’existe pas de densité critique et donc pas de condensat généralisé ; mais qu’en est-il en présence d’interactions entre particules ?

sens de Fischer qui n'autorise que les anisotropie linéaire avec le rapport d'aspect constant quand les longueurs tendent vers l'infini [52]. Il faut dire que cette notion de limite au sens de Fischer interdit les anisotropies trop fortes en partie pour interdire que les résultats en limite thermodynamique dépendent de la géométrie. Nous représentons sur la figure 2.6 schématiquement les différents modèles tri-dimensionnel isotropes et anisotropes ainsi le modèle bi-dimensionnel sachant qu'en limite thermodynamique nous avons différentes physiques pour les modèles d'anisotropie linéaire, exponentielle et bi-dimensionnel. Malgré la portée philosophique que pourrait donner ce débat, je tiens à donner plusieurs arguments pour défendre d'un point de vue formel et physique cette idée d'influence de la géométrie sur les résultats en limite thermodynamique :

(i) D'un point de vue expérimental, si nous avons $L_1, L_2, L_3 \gg \rho^{-1/3}$ autrement dit que nous avons un régime thermodynamique et que les effets de bords sont négligeables et si le paramètre d'anisotropie $\lambda \gg 1$ ou plutôt que $\ln(\lambda) \gg 1$ pour notre cas, ce qui signifie que le calcul numérique donne une valeur non négligeable des corrections thermodynamiques fourni par notre modèle (de la densité $\rho_m(\beta)$ pour notre cas, c.f. exemple numérique et courbes dans la section 2.5), alors on peut considérer que nous sommes dans le régime décrit par notre modèle géométrique.

(ii) On peut faire la même remarque pour les régimes considéré comme 2D ou 1D lorsque des longueurs dans certaines directions sont trop petites pour avoir un effet thermodynamique [17], [20], .

(iii) La forme de la géométrie influence les résultats en limite thermodynamique. Par exemple, si nous prenons un piège harmonique isotrope (plongé dans l'espace avec les pulsations qui tendent vers zero ou dans une boîte cubique avec le potentiel à l'échelle des tailles de la boîte [58]), en limite thermodynamique nous allons obtenir des résultats différents pour la forme de la densité critique globale. Il en est de même pour le cas anisotrope, voir les chapitres 2 et 3.

2.5 Seconde température critique et fractions condensées

D'un point de vue expérimental, il est plus intéressant de connaître les températures critiques associées aux densités critiques correspondantes. On considère la densité de particules ρ dans la boîte fixée, paramètre thermodynamique qui varie est la température T . La première température critique $T_c \equiv T_c(\rho)$ est la solution de l'équation, voir figure 2.7 :

$$\rho = \rho_c(\beta) = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_\beta^3}, \quad (2.18)$$

avec $\beta = 1/k_B T$ et $\lambda_\beta = \hbar \sqrt{2\pi\beta/m}$, ce qui nous donne :

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B \zeta(3/2)^{2/3}} \rho^{2/3}. \quad (2.19)$$

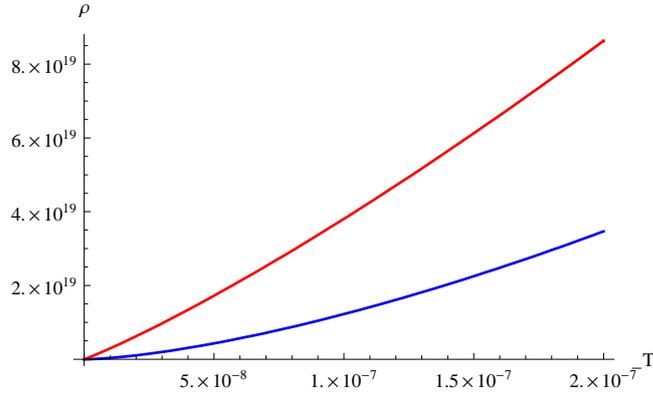


FIG. 2.7 – Diagramme de phases pour un gaz parfait (d’atomes de ^{87}Rb ici pour exemple) avec $\tau = 4.43 \times 10^{-7}\text{K}$, l’axe des abscisse correspond aux températures mesurées en Kelvin (K) et l’axe des ordonné correspond aux densités de particules mesurées en l’inverse d’un volume (inverse de mètre au cube m^{-3}). La courbe bleue $\rho_c(\beta)$ est la première ligne critique pour la transition de Bose-Einstein, la courbe rouge $\rho_m(\beta) = \rho_c(\beta) + 2\alpha/\lambda_\beta^2$ est la seconde ligne critique, avec $\beta = 1/(k_B T)$. Notons qu’au dessus de la courbe rouge nous avons le régime de coexistence entre le quasi-condensat et le condensat sur le mode fondamental, entre les deux courbes nous avons le régime quasi-condensé uniquement et en dessous de la courbe bleu nous avons le régime de gaz thermique (non-condensé)

De la même manière, la seconde température critique $T_m \equiv T_m(\rho)$ est la solution de l’équation :

$$\rho = \rho_m(\beta) = \rho_c(\beta) + \frac{2\alpha}{\lambda_\beta^2} = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_\beta^3} + \frac{2\alpha}{\lambda_\beta^2}.$$

Sachant que nous avons l’égalité (2.18) nous pouvons ainsi écrire :

$$T_m^{3/2}(\rho) + \tau^{1/2} T_m(\rho) = T_c^{3/2}(\rho), \quad (2.20)$$

où τ est la *température effective de l’anisotropie exponentielle* donnée par :

$$\tau = \frac{8\pi\hbar^2\alpha^2}{mk_B\zeta(3/2)^2} \quad (2.21)$$

Pour une illustration des deux régimes de condensats, voir la figure 2.7.

Notons que la seconde température critique modifie la loi usuel de fraction condensée en fonction de la température car désormais la densité totale de particules condensées est $\rho - \rho_c(\beta) := \rho_0(\beta) = \rho_{qbec}(\beta) + \rho_{bec}(\beta)$, avec $\rho_{bec}(\beta) := (\rho - \rho_m(\beta)) \theta(\rho - \rho_m(\beta))$.

Pour la fraction quasi-condensée nous obtenons la loi suivante :

$$\frac{\rho_{qbec}(\beta)}{\rho} = \begin{cases} 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, & T_m \leq T \leq T_c, \\ \frac{\sqrt{\tau}}{T_c^{3/2}} T, & T \leq T_m. \end{cases} \quad (2.22)$$

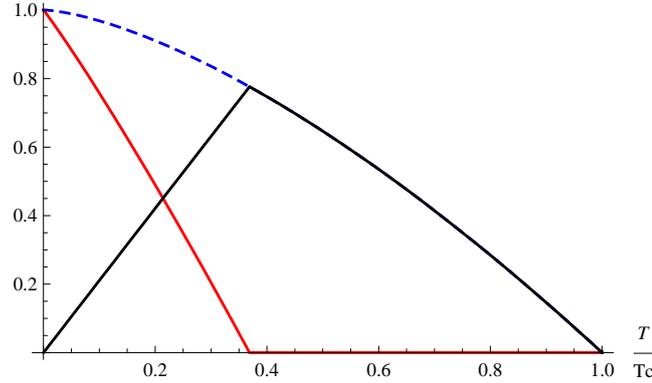


FIG. 2.8 – Courbe illustrant les fractions quasi-condensée en ligne noire (c.f. équation 2.22), condensé sur le mode fondamental en ligne rouge (c.f. équation 2.23) et la courbe de coexistence des deux condensats en ligne pointillée bleu (c.f. équation 2.24), avec $\frac{\tau}{T_c} = 4.43$.

Concernant le condensat conventionnel, nous obtenons la relation suivante, différente de l'expression standard, c.f. [11] :

$$\frac{\rho_{bec}(\beta)}{\rho} = \begin{cases} 0, & T_m \leq T \leq T_c, \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} (1 + \sqrt{\frac{\tau}{T}}), & T \leq T_m, \end{cases} \quad (2.23)$$

La densité totale condensée $\rho_0(\beta) := \rho_{qbec}(\beta) + \rho_{bec}(\beta)$, résultant de la *coexistence* des deux condensats, donne l'expression standard :

$$\frac{\rho_0(\beta)}{\rho} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}. \quad (2.24)$$

Voir la figure 2.8 comme illustration des relations (2.22), (2.23), (2.24).

Nous pouvons calculer explicitement l'écart relatif entre les deux températures critiques, voir figure 2.9 :

$$\frac{T_c - T_m}{T_c} = g\left(\frac{\rho_\alpha}{\rho}\right), \quad (2.25)$$

où $\rho_\alpha := 8\alpha^3/\zeta(3/2)^2$ et $g(x)$ est une fonction algébrique explicite (méthode de Cardan) :

$$g(x) = 1 - (1/9)(\Gamma(x)^{1/3} + x^{2/3}\Gamma(x)^{-1/3} - x^{1/3})^2, \quad (2.26)$$

avec $\Gamma(x) = (27 - 2x + 3\sqrt{3}\sqrt{27 - 4x})/2$.

Comme exemple numérique, prenons un gaz parfait d'atomes de ^{87}Rb dans notre modèle *quasi-2D* dans un piège avec les tailles caractéristiques $L_1 = L_2 = 100\mu\text{m}$, $L = 1\mu\text{m}$ et avec comme température critique $T_c = 10^{-7}\text{K}$. Le paramètre d'anisotropie exponentielle est alors $\alpha = (1/L)\ln(L_1/L) = 4,6 \cdot 10^6\text{m}^{-1}$, et donc la température caractéristique de l'anisotropie est $\tau = 4,4 \cdot 10^{-7}\text{K}$. Nous trouvons alors comme seconde température critique $T_m = 3,7 \cdot 10^{-8}\text{K}$ and $(T_c - T_m)/T_c = 0,63$.

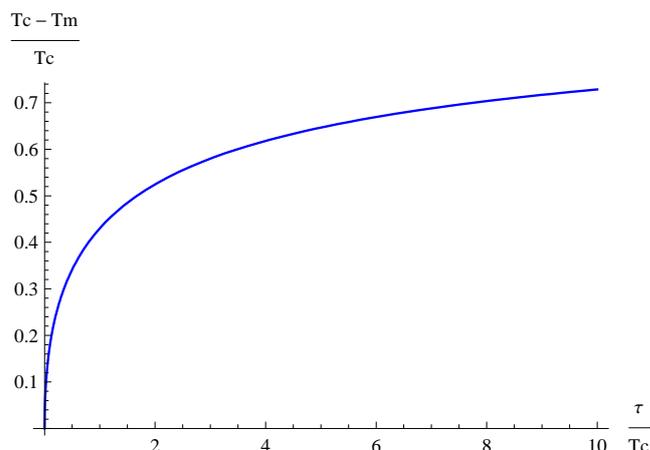


FIG. 2.9 – Courbe illustrant les relations (2.25) avec $\frac{\tau}{T_c}$ en abscisse et l'écart relatif en ordonnées.

2.6 Localisation et longueur de cohérence des condensats

Nous avons vu dans le premier chapitre que le critère usuel de condensation de Penrose et Onsager [9], les corrélations à longue portée (ou ordre à longue portée), est équivalent au critère de condensation généralisée de van den Berg, Lewis et Pulé [28], [14]. Dans le chapitre 1, nous avons montré que l'approche d'échelle de la condensation généralisée permet de classifier les corrélations à longue portée en fonction de la localisation en impulsion du condensat généralisé, cette classification que nous avons appelé *hiérarchie des corrélations* se trouve en calculant la longueur de cohérence du condensat défini comme l'échelle maximale (ou plutôt supremum), par rapport aux longueurs de la boîte, permettant l'existence de l'ordre à longue portée. Rappelons que pour un condensat de type III, nous avons trouvé pour les boîtes de Casimir que l'échelle est mésoscopique dans la direction d'anisotropie maximale. Pour le quasi-condensat, ou condensat de type III que nous obtenons dans le régime $\rho < \rho_m(\beta)$ dans les boîtes de van den Berg, nous pouvons ainsi supposer qu'il en est de même, sauf que notre modèle est quasi-2D et donc la longueur de cohérence va certainement être mésoscopique dans les deux directions du plan $(x_1, x_2, 0)$. La connaissance formelle de ce que nous appelons "*longueur de cohérence*" est importante d'un point de vue phénoménologique car c'est ce qui permet dans l'expérience d'interpréter la notion de "*quasi-condensat*" [17], [16]. On définit en phénoménologie la notion de quasi-condensat si on observe un "*quasi-long range order*" [20], que l'on peut traduire simplement par "*ordre de quasi-longue portée*".

Rappelons le critère usuel de Penrose et Onsager, pour un gaz de Bose dans une boîte de van den Berg Λ_L . Soit une densité de particule fixée ρ et un potentiel chimique $\mu_L(\beta, \rho)$ solution de $\rho = N_L(\beta, \mu)/V_L$, on définit après la limite thermody-

namique la fonction de corrélation entre deux points fixés x et x' :

$$\sigma(x, x') := \lim_{L \rightarrow \infty} \sigma_L(x, x') = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_k \frac{\bar{\psi}_k(x) \psi_k(x')}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu_L(\beta, \rho))} - 1}.$$

Il existe un ordre à longue portée si :

$$\sigma(\beta, \rho) \equiv \lim_{\|x-x'\| \rightarrow \infty} \sigma(x, x').$$

2.6.1 Localisation des condensats

La partie diagonale définit la fonction densité locale $\rho(x) := \sigma(x, x)$. Il est intéressant de connaître selon la nature du condensat quelle est son échelle de localisation, ce qui revient à étudier la fonction densité locale. On introduit la fonction densité locale à l'échelle des tailles de la boîte [28], [29] :

$$\xi_L(u) := \sum_k \frac{|\psi_k(L_1 u_1, L_2 u_2, L_3 u_3)|^2}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}, \quad (2.27)$$

avec les distances $u_\nu = x_\nu / L_\nu \in (0, 1)$, $\nu = 1, 2, 3$.

Pour une densité donnée de particules ρ , la fonction (2.27) s'écrit :

$$\xi_{\rho, L}(u) := \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{1}{\exp\left(\beta\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2 n_1^2}{L_1^2} + \frac{\pi^2 n_2^2}{L_2^2} + \frac{\pi^2 n_3^2}{L_3^2}\right) - \mu_L(\beta, \rho)\right)\right) - 1} \prod_{\nu=1}^3 \frac{2}{L_\nu} [\sin(\pi n_\nu u_\nu)]^2. \quad (2.28)$$

comme $2[\sin(\pi n_\nu u_\nu)]^2 = 1 - \cos\{(2\pi n_\nu / L_\nu)u_\nu L_\nu\}$ et $\lim_{L \rightarrow \infty} \mu_L(\beta, \rho < \rho_c(\beta)) < 0$, par le lemme de Riemann-Lebesgue, on obtient que $\lim_{L \rightarrow \infty} \xi_{\rho, L}(u) = \rho$ pour tout $u \in (0, 1)^3$.

Si $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$, nous procédons comme dans (2.3)-(2.4). Alors pour tout $u \in (0, 1)^3$, on a pour le quasi-condensat :

$$\begin{aligned} & \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n=(n_1, n_2, 1)} \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2 n_1^2}{L_1^2} + \frac{\pi^2 n_2^2}{L_2^2} + \frac{\pi^2 n_3^2}{L_3^2}\right) - \mu_L(\beta, \rho)\right)} - 1} \prod_{\nu=1}^3 \frac{2}{L_\nu} [\sin(\pi n_\nu u_\nu)]^2 \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2[\sin(\pi u_3)]^2}{(2\pi)^2 L} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{\prod_{\nu=1}^2 (1 - \cos(2k_\nu u_\nu L_\nu)) d^2 k}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m + \Delta_L(\beta, \rho))} - 1} \\ &= (\rho - \rho_c(\beta)) 2[\sin(\pi u_3)]^2, \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$(2.30)$$

et pour la partie non condensée :

$$\begin{aligned} & \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{s \neq (n_1, n_2, 1)} \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2 n_1^2}{L_1^2} + \frac{\pi^2 n_2^2}{L_2^2} + \frac{\pi^2 n_3^2}{L_3^2}\right) - \mu_L(\beta, \rho)\right)} - 1} \prod_{\nu=1}^3 \frac{2}{L_\nu} [\sin(\pi s_\nu u_\nu)]^2 \\ &= \rho_c(\beta). \end{aligned}$$

La limite de (2.28) est égale à

$$\xi_\rho(u) = (\rho - \rho_c(\beta)) 2[\sin(\pi u_3)]^2 + \rho_c(\beta) . \quad (2.31)$$

On voit donc le phénomène d'*anisotropie spatiale* du quasi-condensat (condensat généralisé de type III) pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$ qui est visible uniquement dans la troisième direction u_3 , il n'est pas visible pour les échelles u_1, u_2 dans le plan x_1, x_2 .

Pour $\rho > \rho_m(\beta)$ on utilise la représentation (2.3) et l'asymptotique (2.6), (2.7). D'après les mêmes arguments que pour le cas $\rho < \rho_m(\beta)$, on obtient :

$$\begin{aligned} \xi_\rho(u) = (\rho - \rho_m(\beta)) \prod_{\nu=1}^3 2[\sin(\pi u_\nu)]^2 + \\ (\rho_m(\beta) - \rho_c(\beta)) 2[\sin(\pi u_3)]^2 + \rho_c(\beta) . \end{aligned} \quad (2.32)$$

On trouve ici que le condensat sur l'état fondamental est visible dans tout le volume de la boîte, ce qui est connu usuellement par contre le quasi-condensat saturé lui n'est pas visible sur les bords de la boîte dans le plan x_1, x_2 , comme ce que nous avons vu pour le cas $\rho < \rho_m(\beta)$.

D'un point de vue physique cela signifie que :

- si l'on trace la fonction de distribution de densité du condensat entre les deux bords de la boîte dans le plan x_1, x_2 , on ne verra que le condensat usuel sur le modes fondamental, avec une forme sinusoidale de période spatial $2\pi/L_1$, et donc le quasi-condensat est localisé dans une échelle plus petite au centre de la boîte (cette échelle correspond à celle de cohérence).

- si l'on observe un liquide quantique, type Hélium, entre deux plaques parallèles de longueur très grande devant la distance qui les sépare, pour une densité inférieure à la seconde densité critique, le condensat touche les deux plaques malgré sa localisation au centre de celles-ci. Ainsi même si les fluctuations pour le quasi-condensat ne sont pas anormales (pas macroscopiques, mais quand même mésoscopiques) [28], leurs effets sur les plaques ce qui peut avoir un lien avec l'effet Casimir sur les plaques [59], [60].

2.6.2 Fonction de corrélation et longueur de cohérence

Nous allons maintenant calculer la fonction de corrélation entre deux points autour du centre de la boîte $x_\nu = \tilde{x}_\nu + L_\nu/2$ and $x'_j = \tilde{x}'_j + L_j/2$

$$\sigma_\Lambda(\tilde{x}, \tilde{x}') = \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\mu_L(\beta,\rho)} R_\perp^{(j)} R_3^{(j)} , \quad (2.33)$$

où $R_\perp^{(j)}$ représente les corrélations pour l'indice j de la somme du membre de droite de (2.33) dans le plan $(x_1, x_2, 0)$:

$$R_\perp^{(j)}(\tilde{x}_\perp, \tilde{x}'_\perp) = \sum_{k=(k_1, k_2, \pi/L_3)} e^{-j\beta\varepsilon_k} \overline{\psi}_k(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) \psi_k(\tilde{x}'_1, \tilde{x}'_2) \quad (2.34)$$

et $R_3^{(j)}$ représente les corrélations pour l'indice j sur l'axe $(0, 0, x_3)$:

$$R_3^{(j)}(\tilde{x}_3, \tilde{x}'_3) = \sum_{k=(0,0,k_3)} e^{-j\beta\varepsilon_k} \sqrt{\frac{2}{L_3}} \sin(k_3(\tilde{x}_3 + \frac{L_3}{2})) \sqrt{\frac{2}{L_3}} \sin(k_3(\tilde{x}'_3 + \frac{L_3}{2})) . \quad (2.35)$$

De la même manière que (2.3), pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$ nous pouvons séparer la somme sur les modes pour (2.33) en deux parties :

$$\sigma_L(x, x') = \sigma_{L,qbec}(x, x') + \sigma_{L,therm}(x, x'),$$

où la première partie est la fonction de corrélation pour la partie quasi-condensée :

$$\sigma_{L,qbec}(x, x') = \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\mu_L(\beta,\rho)} \sum_{k=(k_1,k_2)} e^{-j\beta\varepsilon_k} \bar{\psi}_k(\tilde{x}) \psi_k(\tilde{x}')$$

et la deuxième partie est la fonction de corrélation pour la partie non-condensée :

$$\begin{aligned} \sigma_{L,therm}(x, x') &= \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\mu_L(\beta,\rho)} \sum_{k \neq (k_1,k_2)} e^{-j\beta\varepsilon_k} \bar{\psi}_k(\tilde{x}) \psi_k(\tilde{x}') \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^{3/2} \lambda_\beta^3} e^{-4\pi \|\tilde{x} - \tilde{x}'\|^2 / j \lambda_\beta^2} , \end{aligned} \quad (2.36)$$

d'après le théorème généralisé de Weyl.

Pour la première partie, d'après la section 2.3 qui donne la localisation en impulsion du quasi-condensat à l'échelle $k_c(L) = \lambda_\beta \Delta_L(\beta, \rho)^{-1/2}$, on a :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} R_\perp^{(j)}(\tilde{x}_\perp, \tilde{y}_\perp) = \frac{1}{j \lambda_\beta^2} e^{-4\pi \|\tilde{x}_\perp - \tilde{y}_\perp\|^2 \Delta_L / j \lambda_\beta^2},$$

nous obtenons ainsi la partie des corrélations pour le quasi-condensat égale à :

$$\begin{aligned} &\lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L(\beta,\rho)} \frac{1}{j \lambda_\beta^2} e^{-4\|\tilde{x}_\perp - \tilde{x}'_\perp\|^2 \beta \Delta_L / j \lambda_\beta^2} \\ &\times \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi}{L}(\tilde{x}_3 + \frac{L}{2})\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}(\tilde{x}'_3 + \frac{L}{2})\right) . \end{aligned} \quad (2.37)$$

Lorsque $\|\tilde{x}_\perp - \tilde{y}_\perp\|$ est fixé, on obtient :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} R_\perp^{(j)}(\tilde{x}_\perp, \tilde{y}_\perp) = \frac{1}{j \lambda_\beta^2},$$

d'où la forme suivante pour la fonction de corrélation $\sigma(x, x')$ en limite thermodynamique :

$$\sigma(x, x') = 2\rho_{qbec}(\beta, \rho) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^{3/2} \lambda_\beta^3} e^{-4\pi \|\tilde{x} - \tilde{x}'\|^2 / j \lambda_\beta^2} , \quad (2.38)$$

et donc un ordre à longue portée :

$$\lim_{\|x-x'\| \rightarrow \infty} \sigma(x, x') = 2\rho_{qbec}(\beta, \rho).$$

On obtient dans le régime de densités $\rho > \rho_m(\beta)$ la forme suivante pour la fonction de corrélation $\sigma(x, x')$ en limite thermodynamique :

$$\sigma(x, x') = 8\rho_{bec}(\beta, \rho) + 2\rho_{qbec}(\beta, \rho) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^{3/2}\lambda_{\beta}^3} e^{-4\pi\|\tilde{x}-\tilde{x}'\|^2/j\lambda_{\beta}^2}, \quad (2.39)$$

et donc un ordre à longue portée :

$$\lim_{\|x-x'\| \rightarrow \infty} \sigma(x, x') = 8\rho_{bec}(\beta, \rho) + 2\rho_{qbec}(\beta, \rho).$$

Si dans (2.37) on procède au changement d'échelle pour $\|\tilde{x}_{\perp} - \tilde{y}_{\perp}\|^2$ en $\|\tilde{x}_{\perp} - \tilde{y}_{\perp}\|^2 \Delta_L(\beta, \rho)$, la fonction de corrélation pour le quasi-condensat va dépendre de $\|\tilde{x}_{\perp} - \tilde{y}_{\perp}\|^2$ (avec cette nouvelle échelle) et va décroître vers zero quand $\|\tilde{x}_{\perp} - \tilde{y}_{\perp}\|^2$ croît vers l'infini. Cette échelle de longueur définit la notion de *rayon de corrélation* associée au quasicondensat :

$$r_c(L) \equiv \frac{\lambda_{\beta}}{\sqrt{\beta\Delta_L(\beta, \rho)}}.$$

Pour une longueur donnée $\|\tilde{x}_{\perp} - \tilde{y}_{\perp}\|^2 = lr_c(L)$ définie à l'échelle du rayon de corrélation $r_c(L)$, on obtient donc une fonction $L \times \sigma_{L,qbec}(lr_c(L))$ décroissante de l . Lorsque $l \gg 1$, nous pouvons estimer la décroissance de cette fonction :

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{j\beta\Delta_L}}{j\lambda_{\beta}^2} e^{-4\pi l^2/j} &= \int_0^{\infty} d\xi \frac{1}{\lambda_{\beta}^2 \xi} e^{\xi} e^{-4\pi l^2/\xi} (1 + o(1)) \\ &= \frac{2}{\lambda_{\beta}^2} \text{BesselK}(0, \sqrt{l})(1 + o(1)), \end{aligned} \quad (2.40)$$

où $\text{BesselK}(0, x)$, $x > 0$ est la fonction de Bessel du premier ordre [47]. Notons qu'à grand L , la fonction de corrélation pour deux points distant de $lr_c(L)$, $l > 0$ tend vers zero algébriquement en $1/L$:

$$\sigma_{L,qbec} = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{j\beta\Delta_L}}{j} e^{-4\pi l^2/j} + o\left(\frac{1}{L}\right).$$

Ce comportement s'explique par le fait que lorsque $l > 0$, la fonction ne se comporte pas en $\ln(1 - e^{-\Delta_L})$ contrairement au cas $l = 0$.

Nous pouvons aussi définir la *longueur de cohérence* pour le condensat, notée L_{ch} , dans le plan $(x_1, x_2, 0)$ par rapport à l'échelle de longueur L typique de la taille de la boîte :

$$\frac{L_{ch}(\beta, \rho)}{L} \equiv \frac{r_c(L)}{\lambda_{\beta}} = \frac{1}{\sqrt{\Delta_L(\beta, \rho)}}.$$

L'introduction de cette échelle de longueur est nécessaire pour comparer, à volume fini et pour toutes les températures, l'extension de la fonction de corrélation du quasi-condensat en fonction de la taille de la boîte. Un argument similaire est valide pour $\rho > \rho_m(\beta)$ avec la prise en compte du condensat sur le mode fondamental (2.7) et de l'autre asymptotique (2.6) pour la fonction $\Delta_L(\beta, \rho)$.

Le but de l'introduction de cette longueur est donc de comparer avec l'échelle de longueur dans la direction du plan $L_{1,2} = Le^{\alpha L}$. Ainsi nous pouvons écrire cette longueur en fonction d'un exposant $\gamma(\beta, \rho)$ tel que :

$$\frac{L_{ch}(\beta, \rho)}{L} = \left(\frac{L_1}{L} \right)^{\gamma(\beta, \rho)}, \quad (2.41)$$

nous obtenons ainsi :

$$\gamma(\beta, \rho) = \begin{cases} \frac{\lambda_\beta^2}{2\alpha} (\rho - \rho_c(\beta)) & , \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta) \\ \frac{\lambda_\beta^2}{2\alpha} (\rho_m(\beta) - \rho_c(\beta)) & , \rho_m(\beta) \leq \rho . \end{cases} \quad (2.42)$$

Pour une densité fixée ρ , en tenant compte de (2.22) on trouve la dépendance de l'exposant en température, voir figure 2.10 :

$$\gamma(T) = \begin{cases} \sqrt{\frac{T}{\tau}} \left(\left(\frac{T_c}{T} \right)^{3/2} - 1 \right) & , T_m < T < T_c , \\ 1 & , T \leq T_m . \end{cases} \quad (2.43)$$

Numeriquement, pour $L_1 = L_2 = 100\mu m$, $L_3 = 1\mu m$ and $T_m < T = 0.75T_c$ la longueur de cohérence du condensat serait égale à $2.8\mu m \ll 100\mu m$. Cette décroissance de la *longueur de cohérence* a été observée pour un gaz de Bose dans un piège harmonique quasi-1D [16] et quasi-2D [17]. Cependant notons bien que notre système est un gaz parfait, donc sans interactions entre particules, mais tout de même il est remarquable que le facteur géométrique α dans notre modèle d'anisotropie exponentielle provoque cette diminution de cohérence due à l'augmentation énergétique du condensat. Cette augmentation énergétique n'est pas *potentielle* mais purement *cinétique* contrairement à ce qui est compris usuellement [20].

2.6.3 Retour sur l'interprétation de la seconde transition

Nous avons discuté à la fin de la section 2.3, comment nommer cette seconde transition entre les deux *régimes condensés* sachant que cela n'est pas une transition de phase étant donnée que les grandeurs thermodynamiques ne sont pas modifiées au point critique ρ_m ou T_m . Nous avons donné la terminologie suivante pour la définir : *une transition d'échelle*. En m'inspirant de l'étude faite dans cette section des propriétés de cohérences du quasi-condensat, je propose la définition suivante pour la notion de transition d'échelle :

Définition 2.2 *Un système bosonique présente une **transition de phase à l'échelle** ou **transition d'échelle**, si l'une des dérivée successive de l'exposant dans loi*

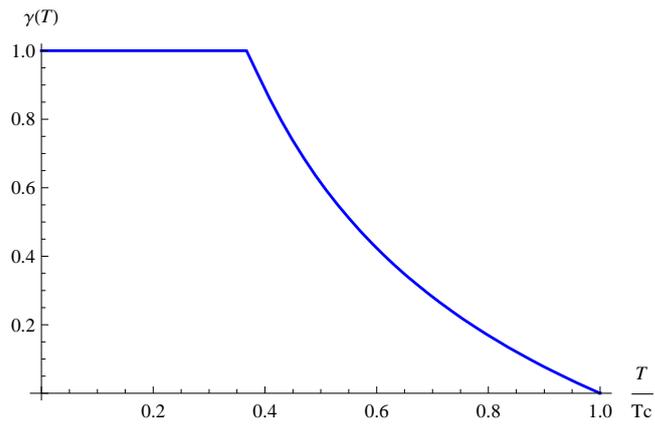


FIG. 2.10 – courbe illustrant l'exposant (2.43) avec $\frac{T}{T_c}$ en abscisse et $\frac{\tau}{T_c} = 4.43$ ce qui nous donne un écart relatif entre les deux densités critiques de 0.63, voir relation 3.15 et la figure 3.3

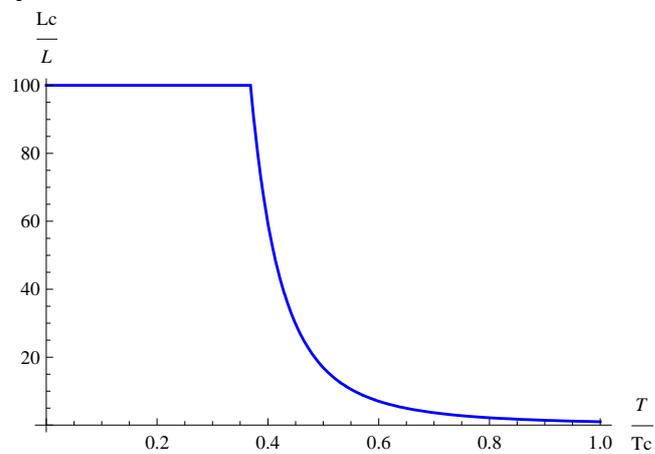


FIG. 2.11 – courbe illustrant la relation (2.41) avec $\frac{T}{T_c}$ en abscisse et $\frac{\tau}{T_c} = 4.43$, pour un rapport d'aspect $\lambda = \frac{L_z}{L_\perp} = 100$

d'échelle donnant l'expression du rayon de corrélation, fonction de paramètres thermodynamique (densité, température), est discontinu en un point critique. On dit que la transition est d'ordre n si la dérivée $n^{\text{ième}}$ de l'exposant est discontinue.

Pour notre système de gaz parfait de Bose dans des boîtes exponentiellement anisotropes, nous avons donc, d'après les résultats de la présente section 2.6, une transition d'échelle d'ordre 1 au point critique $\rho_m(\beta)$ à partir de laquelle nous avons saturation du régime quasi-condensé, de manière analogue à la saturation du gaz thermique à partir de la densité $\rho_c(\beta)$. Nous pouvons interpréter cette saturation comme la saturation de la partie thermique du condensat au sens où l'impulsion des particules quasi-condensées représente la partie "excitée" du condensat total. Ensuite pour continuer à remplir le système de particule nous condensons dans l'état fondamental.

Nous pouvons formuler le résultat sous forme d'un théorème :

Theorème 2.2 *Un gaz parfait de Bose dans des boîtes parallélépipédiques exponentiellement anisotropes quasi-bi-dimensionnelles $\Lambda_L = Le^{\alpha L} \times Le^{\alpha L} \times L$, $\alpha > 0$ présente une **transition de phase à l'échelle** ou **transition d'échelle** d'ordre 1 : on trouve l'expression du rayon de corrélation :*

$$r_c(L) = \lambda_\beta e^{\alpha\gamma(T,\rho)L}$$

où l'exposant $\gamma(T, \rho)$ est donné par :

$$\gamma(\beta, \rho) = \begin{cases} \frac{\lambda_\beta^2}{2\alpha} (\rho - \rho_c(\beta)) & , \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta) \\ \frac{\lambda_\beta^2}{2\alpha} (\rho_m(\beta) - \rho_c(\beta)) & , \rho_m(\beta) \leq \rho . \end{cases}$$

Il serait intéressant d'appliquer ce concept de transition d'échelle à d'autres systèmes bosoniques, fermioniques ou classiques tels que comme exemple pour [56] et [57] pour le modèle sphérique.

2.7 Phénoménologie des atomes froids

D'après ce que nous avons vu dans le chapitre 2, notons que notre modèle géométrique quasi-2D ne mime pas complètement un modèle de piège d'atomes quasi-2D [17] étant donné que ces pièges sont harmoniques (avec les pulsations $\omega_1, \omega_2, \omega_3$) et donc le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes sont différents.

Cependant comme il est signalé dans [55] et comme nous l'avons montré au chapitre 2, si on regarde la densité locale de particules en un point, par exemple au centre du piège, la première densité critique en ce point est la même que celle dans une boîte parallélépipédique en prenant comme taille de confinement caractéristique du piège $L_\nu = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\nu}}$, $\nu = 1, 2, 3$. Ceci est dû au fait que la fonction donnant la densité en ce point $x = 0$ est fonction des polynômes d'Hermite qui dépendent des nombres quantiques qui tendent vers des fonctions sinusoidales, lorsque les nombres

quantiques sont très grand devant l'unité (oscillation très rapide) [47], et donc par intégration sur les niveaux d'énergies non nul de la densité de particules dans chaque énergie pour un potentiel chimique donné, on retrouve la fonction de densité du gaz de Bose dans une boîte. Le raisonnement conduisant à introduire la condensation de Bose-Einstein au point du centre du piège est donc similaire à celle pour le gaz de Bose dans une boîte, à savoir fixer la densité et adapter le potentiel chimique. Lorsque nous avons ces dimensions caractéristiques du piège $L_\nu(L)$, $\nu = 1, 2, 3$, $L > 0$ qui obéissent à la même loi d'anisotropie donné par le modèle exponentiel, nous pouvons faire la même remarque concernant le comportement des fonctions d'ondes en un point $x \in \mathbb{R}^3$ (e.g. $x = 0$) dans des modes non nuls localisés avec une certaine échelle dépendante du potentiel chimique autour du mode fondamental avec des nombres quantiques quand même très grands devant l'unité. Ainsi leur comportement pour L grand est sinusoidal, ce qui permet de transposer les résultats obtenus pour le gaz de Bose dans des boîtes anisotrope exponentiellement au cas du piège quasi-2D exponentiel, et nous trouvons ainsi les mêmes résultats pour la seconde densité/température critique. En conclusion, les résultats pour notre modèle de gaz de Bose anisotrope exponentiel, théoriques et numériques, constituent une première approche prédictive pour le comportement local du gaz de Bose dans des pièges quasi-2D, notamment pour la longueur de cohérence et la fonction de corrélation entre deux points, pour avoir un aperçu des courbes expérimentales voir [17].

Description su système :

Soit un gaz parfait de Bose dans un piège harmonique tri-dimensionnel :

$$V(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_3^2),$$

l'hamiltonien à une particule est donné par :

$$-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(x_1, x_2, x_3)$$

On définit les longueurs caractéristiques du confinement sont fonctions des pulsations du pièges $L_\nu = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\nu}}$, $\nu = 1, 2, 3$.

Soit la fonction de corrélation localement défini :

$$g_L(x, x') \equiv \sum_s \frac{\phi_{s,L}(x)\phi_{s,L}(x')}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L}-\mu)} - 1} \quad (2.44)$$

où les fonctions d'ondes $\phi_{s,L}(x)$, $s \in \mathbb{N}^3$ sont données par :

$$\phi_{s,L}(x) = \prod_{\nu=1}^3 \frac{1}{(\pi)^{3/2} L_\nu 2^{s_\nu} s_\nu!} H_{s_\nu}(x_\nu/L_\nu) e^{-x_\nu^2/2L_\nu^2}$$

où $H_n(y)$, $y \in \mathbb{R}^1$, $n \in \mathbb{N}$ sont les polynômes d'Hermite [Abraham]. Les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$\varepsilon_{s,L} = \sum_{\nu=1}^3 \hbar \omega_{\nu} (s_{\nu} + \frac{1}{2}), \quad \omega_{\nu} = \frac{\hbar}{mL_{\nu}^2}, \quad \nu = 1, 2, 3 .$$

La fonction densité locale de particules est définie comme la partie diagonale de la fonction de corrélation :

$$\rho_L(x) \equiv g_L(x, x) = \sum_s \frac{|\phi_{s,L}(x)|^2}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L} - \mu)} - 1} \quad (2.45)$$

Résultat :

Tous les résultats que nous avons vu précédemment dans ce chapitre pour le gaz de Bose dans des boîtes quasi-2D s'appliquent d'un point de vue local pour un gaz parfait de Bose dans un piège harmonique dit "quasi-bi-dimensionnel" (quasi-2D) défini par le modèle d'anisotropie exponentielle $L_1 = L_2 = Le^{\alpha L}$, $L_3 = L$, où L_{ν} , $\nu = 1, 2, 3$ sont les longueurs de confinement.

Plus formellement, pour la fonction densité locale en un point $x \in \mathbb{R}^3$, il existe en limite thermodynamique deux densités critiques : la première $\rho_c(x) = \zeta(2/3)/\lambda_{\beta}^3$ séparant le régime non-condensé/condensé et la deuxième $\rho_m(x) = \rho_c(x) + 2\alpha/\lambda_{\beta}^2$ séparant le régime quasi-condensé/ coexistence condensé sur le mode fondamental avec quasi-condensat saturé. De plus il existe un ordre à longue portée défini à partir de la fonction de corrélation entre deux points fixes $x, x' \in \mathbb{R}^3$ lorsque ces deux points tendent vers l'infini après la limite thermodynamique. Les relations d'échelles concernant les localisations en impulsion et les longueurs de cohérences sont aussi les mêmes que précédemment pour le gaz dans les boîtes quasi-2D.

Raisonnement :

Nous allons présenter le raisonnement pour les densités locales au point particulier du centre du piège $x = 0$ pour simplifier les calculs, mais en toutes généralité rien est modifié car pour $x \neq 0$ fixé, comme les longueurs de confinement tendent vers l'infini, les calculs ne dépendent pas de la valeur de x et tout se passe comme si $x = 0$ au final.

Nous allons tout d'abord calculer la densité de particules dans le gaz pour $\mu < 0$ en limite thermodynamique, sachant que nous avons la condition suivante $\mu < \inf_s \varepsilon_s$

à volume fini.

$$\begin{aligned}
 \rho(\beta, \mu; x = 0) &:= \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{s=(s_1, s_2, s_3)} \frac{|\phi_{s,L}(x=0)|^2}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L}-\mu)} - 1} \\
 &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{(s_1, s_2, s_3)} \frac{1}{\pi^{3/2} 2^{s_1+s_2+s_3} s_1! s_2! s_3!} \frac{H_{s_1}(0)^2 H_{s_2,L}(0)^2 H_{s_3}(0)^2}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L}-\mu)} - 1} \\
 &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{s_1, s_2, s_3} \frac{(2s_1)!(2s_2)!(2s_3)!}{\pi^{3/2} 2^{2s_1+2s_2+2s_3} (s_1! s_2! s_3!)^2} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{m}(\frac{2s_1}{L_1^2} + \frac{2s_2}{L_2^2} + \frac{2s_3}{L_3^2}) - \mu)} - 1}
 \end{aligned}$$

car les fonctions de Hermite en $x = 0$ sont nulles pour les nombres s_ν impaires. D'après cette dernière expression, sachant que $s_\nu! \simeq \sqrt{2\pi s_\nu} 2^{s_\nu} s_\nu^{s_\nu} e^{-s_\nu}$, $\nu = 1, 2, 3$ pour $s_\nu \gg 1$, on trouve :

$$\begin{aligned}
 \rho(\beta, \mu; x = 0) &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{s_1, s_2, s_3} \frac{1}{\pi^3 (s_1 s_2 s_3)^{1/2}} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{m}(\frac{2s_1}{L_1^2} + \frac{2s_2}{L_2^2} + \frac{2s_3}{L_3^2}) + \mu)} - 1} \\
 &= \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\mu} \prod_{\nu=1}^3 \frac{1}{L_\nu} \sum_{s_\nu} \frac{1}{\pi(s_\nu)^{1/2} L_\nu} e^{-j\beta \frac{\hbar^2}{m} \frac{2s_\nu}{L_\nu^2}}
 \end{aligned}$$

en changeant de variable $s_\nu \mapsto s_\nu/(L_\nu^2)$, $\nu = 1, 2$, nous pouvons écrire la dernière équation comme une intégrale sur les niveaux d'énergie :

$$\begin{aligned}
 \rho(\beta, \mu; x = 0) &= \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\mu} \int_0^\infty d\xi_\nu \frac{1}{\pi(\xi_\nu)^{1/2}} e^{j \frac{\lambda_\beta}{\pi} \xi_\nu \Delta_L} \\
 &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\mu} \frac{1}{\lambda_\beta^3 j^{3/2}} \\
 &= \frac{g_{3/2}(e^{\beta\mu})}{\lambda_\beta^3}.
 \end{aligned}$$

Comme le potentiel chimique $\mu < 0$ en limite thermodynamique, nous arrivons à la même conclusion que pour le gaz parfait de Bose dans des boîtes parallélépipédiques, à savoir qu'il existe une densité critique de saturation de la partie thermique du gaz donnée par l'expression :

$$\rho_c(\beta; x = 0) = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_\beta^3}.$$

Etudions ce qui se passe pour une densité fixée $\rho(x = 0) > \rho_c(\beta; x = 0)$

les densités locales de particules dans les nombres quantiques $s \in \mathbb{N}^{3,*}$ sont données par :

$$\begin{aligned}
 \rho_L(x; s) &:= \frac{|\phi_{s,L}(x)|^2}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L}-\mu)} - 1} \\
 &= \prod_{\nu=1}^d \frac{1}{(\pi)^{3/2} L_\nu 2^{s_\nu} s_\nu!} \frac{H_{s_\nu}(x_\nu/L_\nu)^2 e^{-x_\nu^2/L_\nu^2}}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L}-\mu)} - 1}
 \end{aligned}$$

Lorsque l'on a le modèle d'anisotropie exponentielle $L_1(L) = L_2(L) = Le^{\alpha L}$, $L_3 = L$, pour $\rho(x=0) > \rho_c(\beta; x=0)$ fixé, avec $x \in \mathbb{R}^3$, on peut sommer sur les nombres quantiques dans le plan $(s_1, s_2, 0)$, que nous notons $\rho_{qbec}(\beta; x=0)$, et chercher le potentiel chimique $\mu_L = \varepsilon_{(0,0,0),L} - \Delta_L$ solution de l'équation $\rho(0) = \rho_L(0; s) > \rho_c(\beta; 0)$:

$$\begin{aligned} \rho_{qbec}(\beta; x=0) &:= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{s=(s_1, s_2, 0)} \frac{|\phi_{s,L}(x=0)|^2}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L} - \mu_L)} - 1} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{(s_1, s_2, 0)} \frac{1}{(\pi L_1 L_2 2^{s_1+s_2} s_1! s_2!)} \frac{H_{s_1}(0)^2 H_{s_2,L}(0)^2}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L} - \mu_L)} - 1} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{s_1, s_2} \frac{(2s_1)!(2s_2)!}{(\pi L_1 L_2) 2^{2s_1+2s_2} (s_1! s_2!)^2} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{m}(\frac{2s_1}{L_1^2} + \frac{2s_2}{L_2^2}) + \Delta_L)} - 1} \end{aligned}$$

car les fonctions de Hermite en $x=0$ sont nulles pour les nombres s_ν impaires. D'après cette dernière expression, sachant que $s_\nu! \simeq \sqrt{2\pi s_\nu} 2^{s_\nu} s_\nu^{s_\nu} e^{-s_\nu}$, $\nu = 1, 2$ pour $s_\nu \gg 1$, on trouve :

$$\begin{aligned} \rho_{qbec}(\beta; x=0) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{s_1, s_2} \frac{1}{L_1 L_2 \pi^2 (s_1 s_2)^{1/2}} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{m}(\frac{2s_1}{L_1^2} + \frac{2s_2}{L_2^2}) + \Delta_L)} - 1} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L} \prod_{\nu=1}^2 \sum_{s_\nu} \frac{1}{\pi (s_\nu)^{1/2} L_\nu} e^{-j\beta\frac{\hbar^2}{m} \frac{2s_\nu}{L_\nu^2}} \quad (2.46) \end{aligned}$$

comme nous l'avons vu dans la section 2.3 pour le gaz de Bose dans la boîte, en changeant de variable $s_\nu \mapsto s_\nu / (L_\nu^2 \Delta_L)$, $\nu = 1, 2$, nous localisons dans l'espace des moments le quasi-condensat et nous pouvons écrire la dernière équation (2.46) comme une intégrale sur les niveaux d'énergie dans le plan 2D :

$$\begin{aligned} \rho_{qbec}(\beta; x=0) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L} \Delta_L \prod_{\nu=1}^2 \int_0^\infty d\xi_\nu \frac{1}{\pi (\xi_\nu)^{1/2}} e^{-j\frac{\lambda_\beta}{\pi} \xi_\nu \Delta_L} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L} \frac{1}{\lambda_\beta^2 j} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{-1}{L \lambda_\beta^2} \ln(1 - e^{-\beta\Delta_L}) . \end{aligned}$$

Sachant que la fonction Δ_L tend vers zero quand L tend vers l'infini, on peut développer le logarithme et sachant que le surplus de densité locale en $x=0$ doit se trouver dans le plan :

$$\begin{aligned} \rho_{qbec}(\beta; x=0) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{-1}{L} \ln(1 - e^{-\beta\Delta_L}) \\ &= \rho(x=0) - \rho_c(\beta; x=0) \end{aligned}$$

on trouve ainsi l'asymptotique pour la fonction Δ_L :

$$\Delta_L = \beta^{-1} e^{-\lambda_\beta^2(\rho(0) - \rho_c(\beta; 0))L} + \dots$$

Le raisonnement concernant la seconde densité critique est le même que pour le gaz dans la boîte, avec la même valeur et la même conclusion concernant la saturation du quasi-condensat et de la coexistence avec un condensat usuel pour la densité locale supérieure à la seconde densité critique. Nous pouvons écrire la seconde densité critique au centre du piège en limite thermodynamique :

$$\rho_m(\beta; 0) = \rho_c(\beta; 0) + \frac{2\alpha}{\lambda_\beta^2}.$$

Par conséquent nous venons de montrer que localement au centre d'un piège quasi-2D exponentiel, nous obtenons exactement les mêmes résultats que pour le gaz dans des boîtes quasi-2D exponentielles pour les valeurs de densités critiques, de températures critiques et de fractions condensées.

Concernant les corrélations entre deux points fixes, nous arrivons aux mêmes conclusions. Pour le montrer d'un point de vue rigoureux, calculons la fonction de corrélation dans le quasi-condensat entre deux points $x = 0 + \Delta x$ et $x' = 0 - \Delta x$ dans le plan $(x_1, x_2, 0)$ autour du centre du piège avec $\Delta x = (\Delta x_1, \Delta x_2, 0)$:

$$g_L^{(qbec)}(x, x') := \sum_{s=(s_1, s_2, 0)} \frac{\phi_{s,L}(\Delta x) \phi_{s,L}(-\Delta x)}{e^{\beta(\varepsilon_{s,L} - \mu_L)} - 1}$$

comme nous venons de le voir, les nombres quantiques sont très grands devant l'unité ce qui nous permet notamment de développer le coefficient de normalisation d'une part et d'approximer les polynômes d'Hermite par des sinusoides d'autre part. Dans [47], on trouve que :

$$H_n(x) \approx_{n \gg 1} \frac{n!}{(n/2)!} \cos[(2n+1)^{1/2}x - \frac{n\pi}{2}]$$

et d'après la formule de Stirling :

$$n! \approx_{n \gg 1} \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$$

d'où pour $\nu = 1, 2, 3$ et $s_\nu \gg 1$:

$$\phi_{s_\nu, L_\nu}(x_\nu) \simeq \frac{1}{(\pi L_\nu \sqrt{s_\nu})^{1/2}} \cos[(2s_\nu + 1)^{1/2} \frac{x_\nu}{L_\nu} - \frac{s_\nu \pi}{2}],$$

ce qui donne deux expressions selon la parité du nombre quantique :

$$\begin{aligned} \phi_{s_\nu, L_\nu}(x_\nu) &\simeq \frac{(-1)^{p_\nu}}{(\pi L_\nu \sqrt{s_\nu})^{1/2}} \cos[2(p_\nu + \frac{1}{2})^{1/2} \frac{x_\nu}{L_\nu}], \quad s_\nu = 2p_\nu, \\ &\simeq \frac{(-1)^{p_\nu}}{(\pi L_\nu \sqrt{s_\nu})^{1/2}} \sin[2(p_\nu + \frac{1}{2})^{1/2} \frac{x_\nu}{L_\nu}], \quad s_\nu = 2p_\nu + 1, \end{aligned}$$

on arrive alors à l'expression suivante en prenant en compte que les $s_\nu \gg 1$ (quasi-condensat localisé en $s_\nu/(L_\nu^2 \Delta_L)$) :

$$g_L^{(qbec)}(x, x') \simeq \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L(\beta,\rho)} \prod_{\nu=1}^2 \frac{1}{L_\nu^2} \sum_{s_\nu} \frac{L_\nu}{\pi\sqrt{s_\nu}} \times \left(\cos\left[2s_\nu^{1/2} \frac{\Delta x_\nu}{L_\nu}\right]^2 - \sin\left[2s_\nu^{1/2} \frac{\Delta x_\nu}{L_\nu}\right]^2 \right) e^{-j \frac{\lambda_\beta}{\pi} \frac{n_\nu}{L_\nu^2}} . \quad (2.47)$$

On obtient donc une forme similaire au cas du gaz de Bose dans une boîte exponentiellement anisotrope, pour le voir il suffit de poser $k_\nu = \frac{n_\nu}{L_\nu^2 \beta \Delta_L}$ ce qui nous donne lorsque L tend vers l'infini une forme intégrale pour l'équation (2.47) :

$$g_L^{(qbec)}(x, x') \simeq \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L(\beta,\rho)} \prod_{\nu=1}^2 \times \sqrt{\beta\Delta_L} \int_0^\infty \frac{dk_\nu}{\pi\sqrt{k_\nu}} \left(\cos[2k_\nu^{1/2} \Delta x_\nu \beta \Delta_L]^2 - \sin[2k_\nu^{1/2} \Delta x_\nu \beta \Delta_L]^2 \right) e^{-j\beta\Delta_L \frac{\lambda_\beta}{\pi} k_\nu} .$$

Si nous posons $k'_\nu = \sqrt{k_\nu}$, on obtient :

$$\begin{aligned} g_L^{(qbec)}(x, x') &\simeq \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L(\beta,\rho)} \prod_{\nu=1}^2 \frac{1}{L_\nu^2} \\ &\times \sqrt{\beta\Delta_L} \int_0^\infty dk'_\nu \frac{2}{\pi} \left(\cos[2k'_\nu \Delta x_\nu \beta \Delta_L]^2 - \sin[2k'_\nu \Delta x_\nu \beta \Delta_L]^2 \right) e^{-j\beta\Delta_L \frac{\lambda_\beta}{\pi} k_\nu'^2} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L(\beta,\rho)} \frac{1}{j\lambda_\beta^2} \exp\left(\frac{-4\pi\Delta x \Delta_L}{j\lambda_\beta^2}\right) . \end{aligned}$$

De la même manière que dans la section 2.6, par un changement d'échelle pour $\Delta x \mapsto \Delta x \sqrt{2m\Delta_L/\hbar^2}$, on trouve le rayon de corrélation du quasi-condensat et en introduisant une nouvelle échelle par rapport à la longueur confinement L , orthogonal au plan, on définit la longueur de cohérence du quasi-condensat et nous trouvons les mêmes résultats que pour le cas du gaz dans des boîtes quasi-2D exponentielles, formules (2.20), (2.22), (2.23), (2.24), (2.41), (2.43). Il est intéressant d'avoir une expression explicite de la fonction de corrélation pour le gaz de Bose dans le potentiel harmonique entre deux points équidistant par rapport au centre du piège, à l'échelle du rayon de corrélation. La forme de la fonction est exactement la même que celle pour le gaz de Bose dans la boîte, voir équations (2.38) et (2.39).

2.8 Conclusion

En conclusion dans ce travail pour le gaz parfait de Bose dans la boîte quasi-2D nous avons obtenu des résultats pour l'étude de la seconde transition :

(i) Pour un gaz parfait de Bose dans un modèle de boîte exponentiellement anisotrope, nous avons l'existence d'une seconde transition qui distingue deux régimes condensés différents : un quasi-condensat et une coexistence entre un quasi-condensat saturé et un condensat conventionnel.

(ii) Cette seconde transition apparaît pour une seconde densité critique $\rho_m(\beta) > \rho_c(\beta)$ donnée par (2.5) et la seconde température critique associée T_m est donnée par (2.20). L'existence de la seconde densité/température critique modifie la fraction condensée usuelle puisque nous avons une répartition du condensat en deux parties, ces fractions condensées sont données par (2.22), (2.23), (2.24).

(iii) Nous avons appliqué l'approche d'échelle développée dans le chapitre 1 à notre modèle pour calculer la localisation spatiale des condensats, équations (2.31), (2.31), et les fonctions de corrélations (2.38), (2.39) ainsi que les longueurs de cohérences, équations (3.35), (2.43). L'étude des longueurs de cohérence répond en partie au problème posé dans la conclusion de la revue de R. M. Ziff, G. E. Uhlenbeck, M. Kac [61], à propos de l'ordre hors diagonal pour des films bi-dimensionnel espacés d'une taille très grande mais finie. on considère ici comme système modélisant le film, un milieu exponentiellement anisotrope pour lequel les tailles dans les deux directions du film sont donc exponentiellement plus grande que l'espace entre les deux plaques. Ainsi nous avons présence d'ordre à longue portée, non macroscopique dans les deux grandes directions pour une densité inférieure à ρ_m , mais qui s'étend entre les deux plaques. On a donc une transition entre deux régimes d'ODLRO (pour reprendre leur terme), de mésoscopique (mimant un système plutôt bi-dimensionnel), pour $\rho_c < \rho < \rho_m$, à macroscopique (mimant un système plutôt tri-dimensionnel), pour $\rho > \rho_m$.

(iv) Nous avons revisité la seconde transition par le concept d'échelle introduit dans le chapitre 1, via la nouvelle définition de condensation dite localisée, définition 2.1, qui nous a permis d'écrire le théorème 2.1.

(v) Au final, en vertu de l'étude de la fonction de corrélation du gaz de Bose par la méthode d'échelle, nous avons ouvert la discussion pour définir la seconde transition que nous avons vu comme *une transition d'échelle*, ce qui est différent d'une transition de phase, définition 2.2 : Ainsi, nous avons formulé un résultat à propos de la nature de la seconde transition dans le cas du gaz parfait de Bose dans des boîtes exponentiellement anisotropes, sous forme du théorème 2.2.

Nous pouvons faire trois remarques théoriques pour conclure le travail et proposer des perspectives intéressantes :

(1) Pour l'hélium superfluide, pour lequel usuellement on considère une seule transition vers un condensat conventionnel, notre travail à propos de la seconde transition constitue une première base si on veut élargir les possibilités de condensations pour ce système. Par exemple, dans certains types de milieux géométriques "slabs" ou capillaires, on pourrait être amené à repenser la théorie superfluide de Bogoliubov en tenant compte de la distribution énergétique du condensat et la théorie générale de condensation de Penrose et Onsager en tenant compte des échelles de

corrélation de longues portée.

(2) Dans ce chapitre nous ne sommes pas entrés dans la théorie des fluctuations de phases [17], [19], bien que cela serait possible d'étudier les fluctuations de phases dans le cadre de la condensation généralisée en "allumant" différemment les sources quasi-moyennes de Bogoliubov dans les modes condensés. Notons que certains types d'interactions *repulsives* entre particules sont capables de *transformer* le condensat usuel (*type* I sur le mode fondamental) en un condensat généralisé de *type* III, (ou quasi-condensat) [62], [63], ainsi que pour un gaz parfait sous un potentiel extérieur aléatoire [64]. Il serait intéressant de comprendre l'importance physique de ce type de modèle ainsi que le rôle de la géométrie vis à vis de ces interactions, et même vis à vis des autres modèles d'interactions plus conventionnels.

(3) Pour le gaz d'atome froid (e.g. Rubidium) dans un piège harmonique quasi-2D, si on étudie localement autour du centre du piège, le comportement mathématique des fonctions de densités locales et de corrélations locales pour le gaz parfait sont similaires à celles pour le modèle du gaz parfait dans une boîte quasi-2D dont l'étude est faite ici, voir le début de la revue [55]. Ainsi ce travail constitue une base théorique pour le cas du gaz en très faible interaction lorsque l'on procède à une étude locale des corrélations et des densités, ce qui est en partie fait pour de récentes expériences [17], même si nous reconnaissons les limites du modèle sans interaction pour lequel la transition BKT n'existe pas.

(4) De plus, d'un point de vue académique le modèle d'anisotropie exponentielle ici présenté peut-être une première approche de la condensation pour les gaz parfaits de Bose dans des boîtes quasi-2D.

Chapitre 3

Seconde transition pour le gaz de Bose dans un piège harmonique

With a certain temperature the molecules "condense" without attractive forces, i.e., they pile up the velocity zero. The theory is beautiful but does it also have some truth ?

A. Einstein à P. Ehrenfest, 29 Novembre 1924, Albert Einstein Archives, The Hebrew University of Jerusalem, Israel ; [3]).

Dans ce chapitre, les prédictions théoriques concernant la seconde transition pour un gaz parfait de bosons dans un piège quasi-uni-dimensionnel harmonique, qui ont fait l'objet d'une publication [30], est à mettre en parallèle à une prédiction expérimentale concernant la chute de la longueur de cohérence du condensat allongé et l'existence d'une température dite "de phase" à partir de laquelle le condensat redevient cohérent dans tout le piège [16]. Il existe une prédiction théorique [20] pour le gaz en interaction, cependant l'effet du facteur géométrique sur la diminution de la cohérence du condensat et sur sa répartition énergétique n'est pas totalement élucidé dans les modèles existant contrairement à notre modèle. Ce travail donne donc une interprétation théorique pour le gaz parfait (proche d'un régime de faibles interactions) de possibles expériences pour les gaz froids en milieux anisotropes.

3.1 Introduction

Il est bien connu depuis 1925 [1] que pour un gaz parfait de bosons identiques de masse m dans une boîte cubique $\Lambda = L^3$ décrit par l'ensemble grand-canonique (V, T, μ) avec T la température et μ le potentiel chimique, il existe une densité critique de saturation du gaz thermique $\rho_c = \zeta(3/2)/\lambda_\beta^3$, où $\lambda_\beta = \hbar\sqrt{2\pi\beta/m}$ est la longueur thermique et $\beta = 1/k_B T$. L'hypothèse d'A. Einstein reprise en 1938 [4] par F. London suppose que pour une densité de particules ρ supérieur à la densité critique ρ_c , le surplus de particules $\rho - \rho_c$ se met dans l'état fondamental de mode $k = 0$. Ainsi on note que $\rho_{k=0} = \rho - \rho_c$ pour $\rho > \rho_c$. Cependant cet argument

de population macroscopique de l'état fondamental dépend drastiquement de la géométrie de la boîte. C'est ce qu'à d'abord découvert H.Casimir [25] en 1968 pour une certaine géométrie anisotrope et ce qui a motivé les travaux de M.van den Berg, J.Lewis et J.Pulé à partir de 1981 [26]- [29]. Ces derniers ont généralisé le concept de condensation de Bose-Einstein en définissant la densité de condensat en limite thermodynamique pour un gaz de Bose parfait dans une boîte parallélépipédique quelconque $\Lambda = L_x \times L_y \times L_z$ de volume $|\Lambda| = V$:

$$\rho_0 = \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| \leq \eta} \rho_k = \rho - \rho_c.$$

Cette définition inclut toutes les possibilités de provenance d'un condensat, données ici d'après [28] et revisitées [14] en référence aux terminologies récentes [33] :

(i) Le condensat conventionnel ou usuel [14], [33] formé par l'état fondamental (type I [28]).

(ii) Le condensat fragmenté [14], [33] si le condensat généralisé est réparti sur un ensemble (fini/infini) de modes macroscopiquement occupés dans une bande d'énergie proche du mode fondamental i.e. $N_0 = \sum_{k \leq k_c} N_k$, avec $N_k = O(N)$ (type I/II [28]).

(iii) Le quasi-condensat [14], [33] si le condensat généralisé est réparti sur un ensemble de modes mésoscopiquement occupés dans une bande d'énergie proche du mode fondamental i.e. $N_0 = \sum_{k \leq k_c} N_k$, avec $N_k = O(N^\delta)$, $\delta < 1$ (type III [28]).

En 1983 [27], van den Berg proposa un modèle de boîte tri-dimensionnelle exponentiellement anisotrope dans deux directions pour définir une seconde densité critique ρ_m séparant un régime de condensat généralisé de type III (pour $\rho_c < \rho < \rho_m$) vers un régime de condensat généralisé de type I (pour $\rho > \rho_m$). Récemment, nous avons réétudié ce modèle [30] que nous appelons quasi-bi-dimensionnel et nous avons montré qu'il s'agit d'une transition entre deux régimes : de quasi-condensat et de coexistence entre un régime de condensat conventionnel et de quasi-condensat, en montrant notamment que la seconde densité critique ρ_m correspond à une densité de saturation du gaz quasi-condensé de manière similaire à la saturation du gaz thermique pour ρ_c . De plus nous avons calculé la seconde température critique analogue et déterminé les fractions condensées modifiées. Puis nous avons calculé les effets de cette transition sur la longueur de cohérence pour ces deux régimes de condensats généralisés.

Cependant cette transition dans le modèle de boîtes de van den Berg n'existe pas pour le cas quasi-uni-dimensionnel (quasi-1D). Notre découverte ici présentée est l'existence de cette transition entre deux régimes pour le gaz parfait de bosons dans un piège harmonique quasi-1D. Notons que les premiers calculs pour le cas uni-dimensionnel ont été faits par [15]. Dans l'étude faite dans ce chapitre, nous proposons une transition entre un régime condensé "quasi-1D", dit quasi-condensé qui ressemble à l'étude du gaz 1D de [15] vers un régime condensé "3D" dans lequel nous retrouvons un condensat usuel sur le mode fondamental mais qui coexiste avec le quasi-condensat saturé ; le but étant de calculer les fraction condensées, la seconde température critique et de caractériser les propriétés de cohérence. Cette prédiction

théorique est intéressante car nous avons vu dans la littérature expérimentale [16] et théorique [20], l'existence d'une seconde température critique nommée T_ϕ pour des milieux quasi-1D, mais calculée et expliquée différemment de la notre.

3.2 Second nombre critique de particules

Considérons un gaz parfait de bosons dans un piège harmonique tri-dimensionnel caractérisé par les pulsations ω_x , ω_y , ω_z avec le potentiel extérieur suivant :

$$V_{ext}(r) = \frac{1}{2}m\omega_x^2x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2z^2.$$

L'hamiltonien pour une particule est donné par [55] :

$$H_\Lambda^{(N=1)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{ext}(r). \quad (3.1)$$

Les niveaux d'énergie sont alors donnés par :

$$\epsilon_{s_x s_y s_z} = \hbar\omega_x(s_x + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_y(s_y + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_z(s_z + \frac{1}{2}).$$

Soit μ le potentiel chimique de ce système dans l'ensemble grand-canonique, sa valeur doit être inférieure strictement à celle de l'état fondamental pour assurer la convergence de la distribution de Bose-Einstein donnant le nombre statistique moyen de bosons dans chacun des modes, d'expression $N_{s_x s_y s_z} = (e^{\beta(\epsilon_{s_x s_y s_z} - \mu)} - 1)^{-1}$. Ainsi on peut définir le potentiel chimique effectif par rapport au niveau fondamental comme $\mu = \epsilon_{000} - \Delta\mu$. Lorsque ce potentiel $\Delta\mu > 0$ tend vers 0, on sature le gaz thermique et on obtient un nombre critique de particules lorsque la pulsation $\omega_0 = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ tend vers 0 :

$$N \simeq \frac{1}{(\hbar\beta\omega_0)^3} \int_{\mathbb{R}^{3,+}} d^3\epsilon \frac{1}{e^{\beta(\epsilon + \Delta\mu)} - 1} < \frac{\zeta(3)}{(\hbar\beta\omega_0)^3} = N_c.$$

La nature du spectre pour ce piège est différente de celle d'une particule dans une boîte, c'est pour cela que le type de géométrie pour obtenir la seconde transition sera différente. Si on considère que ce piège est anisotrope avec une forme quasi-1D type "cigare" dans l'axe z , on doit avoir la condition $\omega_z \ll \omega_\perp$ avec la pulsation transverse $\omega_\perp = \omega_x = \omega_y$. Usuellement [55], [20], on prend comme modèle $\omega_\perp = \lambda\omega_z$ avec la condition $\lambda \gg 1$. Ainsi on a une anisotropie au niveau des modes dans chaque directions car $\hbar\omega_z \ll \hbar\omega_\perp$. Supposons que dans ce cas le potentiel chimique effectif vérifie cette condition :

$$\hbar\omega_z \ll \Delta\mu \ll \hbar\omega_\perp. \quad (3.2)$$

Alors on peut calculer le nombre d'atomes dans le condensat généralisé (*quasi-condensat*) réparti dans une bande d'énergie sur l'axe z ajustée par la valeur du

potentiel chimique $\Delta\mu$:

$$\begin{aligned} N_{Qbec} &\equiv \sum_{s=(0,0,s_z)} N_s \simeq \frac{1}{\hbar\beta\omega_z} \int_{\mathbb{R}^+} d\epsilon_z \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_z + \Delta\mu)} - 1} \\ &\simeq -\frac{1}{\hbar\beta\omega_z} \ln[\beta\Delta\mu] = N - N_c. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Ainsi pour avoir un nombre macroscopique de particules dans ce condensat, le potentiel chimique effectif doit avoir le comportement suivant :

$$\Delta\mu = \beta^{-1} e^{-\hbar\beta\omega_z(N - N_c)}. \quad (3.4)$$

Cependant, le potentiel chimique $\Delta\mu$ qui détermine la taille de la bande d'énergie, diminue quand le nombre de particule N augmente et donc à partir d'une valeur de N noté N_m , la condition (3.2) ne sera plus valide. Pour un gaz de Bose dans un piège harmonique, contrairement au gaz dans une boîte, il n'y a pas de notion de "densité" de particules dans le piège (ou "densité globale") car le confinement s'opère dans tout l'espace tridimensionnel \mathbb{R}^3 . Cependant on peut introduire un "scaling" pour le nombre de particules qui converge quand N tend vers l'infini et quand ω_0 tend vers 0 [55] :

$$n \equiv \omega_0^3 N. \quad (3.5)$$

On trouve alors que lorsque la condition (3.2) est valide on a $\beta\hbar\omega_z \ll e^{-\hbar\beta(n - n_c)/\omega_\perp^2}$. Pour trouver la condition sur N pour que (3.2) reste valide, on introduit le modèle d'anisotropie de piège quasi-1D exponentiel :

$$\omega_z = \omega_\perp e^{-\omega_c^2/\omega_\perp^2}, \quad (3.6)$$

où $\omega_c > 0$ est une pulsation caractéristique de l'anisotropie exponentielle. Ce modèle permet de comparer la décroissance du potentiel chimique $\Delta\mu$ lorsque les pulsations tendent vers zero par rapport au gap d'énergie $\hbar\omega_z$ entre chaque niveau sur l'axe z . Ainsi, la loi exponentielle figurant dans le modèle (3.6) est imposée par la loi de décroissance exponentiel du potentiel chimique (3.4) de sorte à assurer la validité de la condition (3.2). D'après (3.6) pour assurer la condition (3.2), on trouve que N doit être inférieur à une valeur limite N_m donné par :

$$N_m = N_c + \frac{\omega_c^2}{\hbar\beta\omega_0^3}. \quad (3.7)$$

Maintenant si on dépasse ce nombre critique N_m , on doit alors remplir l'état fondamental :

$$N_{bec} \equiv N_{s=0} = \frac{1}{e^{\beta\Delta\mu} - 1} \simeq \frac{1}{\beta\Delta\mu} = N - N_m, \quad (3.8)$$

et donc le potentiel chimique vaut $\Delta\mu = 1/(\beta(N - N_m))$ et la valeur du quasi-condensat est saturée :

$$N_{Qbec} \simeq -\frac{1}{\hbar\beta\omega_z} \ln[\beta\Delta\mu] = N_m - N_c,$$

car d'après (3.5) $N - N_c = (n - n_c)/\omega_0^3$ et donc :

$$\omega_0^3 N_{Qbec} \simeq -(\hbar\beta)^{-1} \omega_\perp^2 \ln[\omega_0^3/(n - n_c)] \simeq \omega_c^2 (\hbar\beta)^{-1}$$

Nous avons employé la terminologie "*quasi-condensat*" pour la même raison que dans le cas de gaz dans une boîte. En effet, pour $N < N_m$ le nombre de population par modes condensés sur l'axe s_z est de l'ordre de $1 \ll (\beta\Delta\mu)^{-1} \ll N$ car d'après 3.5, N est de l'ordre de $n\omega_0^{-3} \gg e^{\hbar\beta(n-n_c)/\omega_c^2} = (\beta\Delta\mu)^{-1}$ et donc chaque modes condensés contient un nombre mésoscopique de particules bien que $\sum_{s_z} N_{00s_z} = O(N)$ (similaire au condensat généralisé de type III). Pour $N > N_m$, nous avons la même conclusion car chaque mode condensé sur l'axe s_z (sauf sur le fondamental) contient un nombre de particule de l'ordre de $e^{\hbar\beta(n_m-n_c)/\omega_c^2} = \omega_\perp/\omega_z = \omega_\perp^2 \omega_0^{-3} \ll n\omega_0^{-3}$.

Notons que ce modèle d'anisotropie exponentiel est nécessaire pour valider la condition (3.2), et pour définir en "limite thermodynamique" le second nombre critique de particule N_m qui doit être du même ordre que le premier nombre critique N_c , c'est à dire que $n_m \equiv N_m \omega_0^3$ doit converger dans la limite ω_0 tend vers 0. Pour des pulsations finies dans une situation expérimentale donnée, il faut donc calculer le paramètre ω_c en fonction du rapport d'aspect $\lambda = e^{\omega_c^2/\omega_\perp^2}$ et voir si le rapport ω_c/ω_\perp est suffisamment grand pour considérer que l'on se trouve dans un régime exponentiel. Habituellement si l'on considère un régime très anisotrope lorsque $\lambda \gg 1$, pour considérer que le régime est exponentiellement anisotrope, on regarde plutôt la condition $\ln(\lambda) \gg 1$.

3.3 Seconde température critique et fractions condensées

Expérimentalement il est convenable de connaître la température critique associée à la seconde densité critique. La *première* température critique T_c , pour un nombre de particules donné N est solution de l'équation : $N = N_c = \zeta(3)/(\hbar\beta\omega_0)^3$. On obtient :

$$T_c = \frac{\hbar\omega_0}{k_B \zeta(3)^{1/3}} N^{1/3} . \quad (3.9)$$

A partir de l'expression du *second* nombre critique on obtient la relation entre la *première* et la *seconde* température critique notée T_m qui est solution de l'équation $N = N_m = N_c + \omega_c^2/(\hbar\beta\omega_0^3)$:

$$T_m^3 + \tau^2 T_m = T_c^3 , \quad (3.10)$$

où la *température effective d'anisotropie exponentielle* τ est défini pour ce piège comme :

$$\tau = \frac{\hbar\omega_c}{k_B \zeta(3)^{1/2}} \quad (3.11)$$

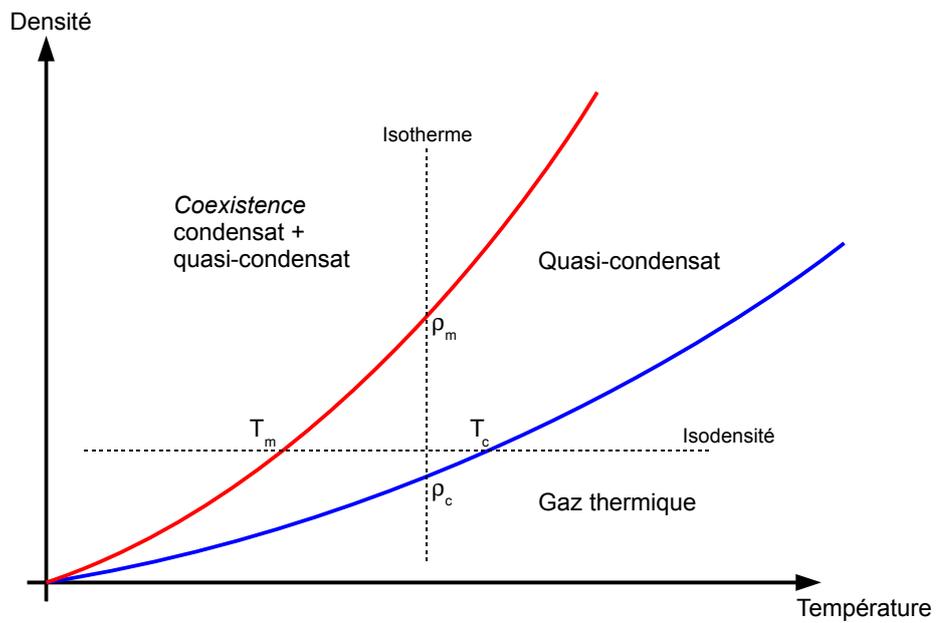


FIG. 3.1 – Courbes illustrant les différents régimes condensés et non condensé

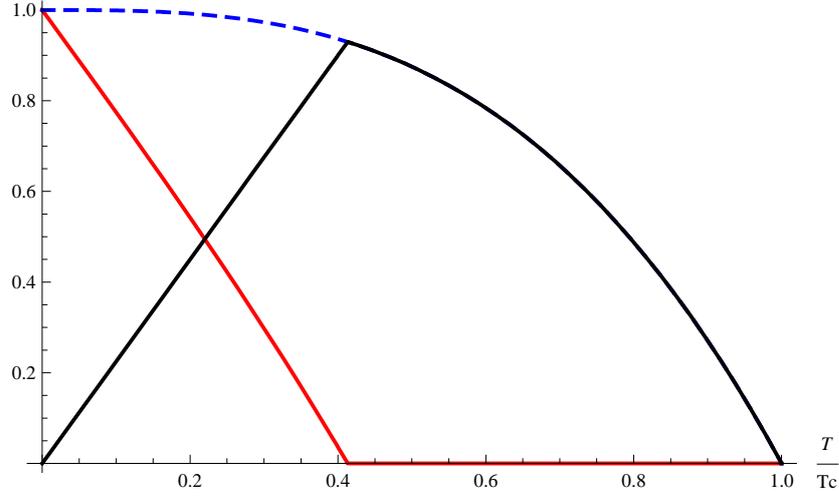


FIG. 3.2 – Courbe illustrant les fractions quasi-condensée en ligne noire (c.f. équation 3.12), condensé sur le mode fondamental en ligne rouge (c.f. équation 3.13) et la courbe de coexistence des deux condensats en ligne pointillée bleu (c.f. équation 3.14), avec $\frac{\tau}{T_c} = \frac{3}{2}$.

D'après (3.3) et (3.9), la fraction quasi-condensée en fonction de la température est donnée par, voir figure 3.2 :

$$\frac{N_{Qbec}}{N} = \begin{cases} 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3, & T_m \leq T \leq T_c, \\ \frac{\tau^2}{T_c^3} T, & T \leq T_m. \end{cases} \quad (3.12)$$

Tandis que pour le condensat sur le mode fondamental on a d'après (3.8), voir figure 3.2 :

$$\frac{N_{bec}}{N} = \begin{cases} 0, & T_m \leq T \leq T_c, \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \left(1 + \left(\frac{\tau}{T}\right)^2\right), & T \leq T_m, \end{cases} \quad (3.13)$$

Et pour le condensat total résultant de la coexistence deux condensats on a, voir figure 3.2 :

$$\frac{N_0}{N} = \frac{N_{Qbec}}{N} + \frac{N_{bec}}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}. \quad (3.14)$$

On peut calculer d'après (3.10) la différence relative entre les deux températures critiques, voir figure 3.3 :

$$\frac{T_c - T_m}{T_c} = f\left(\frac{\tau^3}{T_c^3}\right) \quad (3.15)$$

où :

$$f(x) = 1 - \Omega(x)^{1/3} + \frac{x^{2/3}}{3} \Omega(x)^{-1/3}$$

avec $\Omega(x) = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + \frac{4}{27}x^2})$.

Il pourrait être intéressant de connaître les différentes températures à partir desquelles nous avons une certaine répartition du condensat total entre une partie condensée et une autre quasi-condensée. Par exemple soit $T_m^{(2)}$ la température du système lorsque l'on a la moitié du condensat réparti sur le quasi-condensat et l'autre moitié dans le mode fondamental. A cette température on a une compétition entre les deux condensats, une "vraie" coexistence, ce qui dans l'expérience est important à connaître. Pour la calculer, il suffit de résoudre l'équation $N_{Qbec}(T) = N_{bec}(T)$, ce qui nous donne :

$$(T_m^{(2)})^3 + 2\tau^2 T_m^{(2)} = T_c^3$$

par changement de variable $\tau^{(2)} = \sqrt{2}\tau$, d'après (3.10), (3.15) et en écrivant la seconde température critique $T_m = T_m(\tau)$ comme fonction de τ , on obtient :

$$T_m^{(2)}(\tau) = T_m(\sqrt{2}\tau) .$$

On peut généraliser ce calcul pour toutes les fractions $q \geq 0$ tel que $qN_{Qbec} = N_{bec}$ et obtenir la température solution :

$$T_m^{(q)}(\tau) = T_m(\sqrt{q+1}\tau) . \quad (3.16)$$

Ainsi l'écart relatif est donné par, voir la figure 3.3 :

$$\frac{T_c - T_m^{(q)}(\tau)}{T_c} = f^{(q)}\left(\frac{\tau^3}{T_c^3}\right) = f(\sqrt{q+1}^3 \frac{\tau^3}{T_c^3}) , \quad (3.17)$$

ainsi pour $q = 1$ nous retrouvons l'équation (3.15).

3.4 Longueur de cohérence

D'un point de vue physique, la seconde température critique peut être caractérisée par l'étude de la fonction de corrélation et de la longueur de cohérence dont le comportement est modifié dans le régime de quasi-condensation par rapport au régime de condensation usuel pour le gaz parfait.

3.4.1 Fonction de corrélation intégrée (ou moyenne)

Rappelons la définition de la fonction de corrélation pour un gaz de Bose dans un piège harmonique :

$$g(r, r') = \sum_s \frac{\bar{\phi}_s(r)\phi_s(r')}{e^{\beta(\epsilon_s - \mu)} - 1} , \quad (3.18)$$

où les fonctions d'ondes propres $\phi_s(r)$ sont les fonctions d'Hermite tri-dimensionnelles, rappelons leur expressions :

$$\phi_s(r) = \phi_{s_x}(x)\phi_{s_y}(y)\phi_{s_z}(z),$$

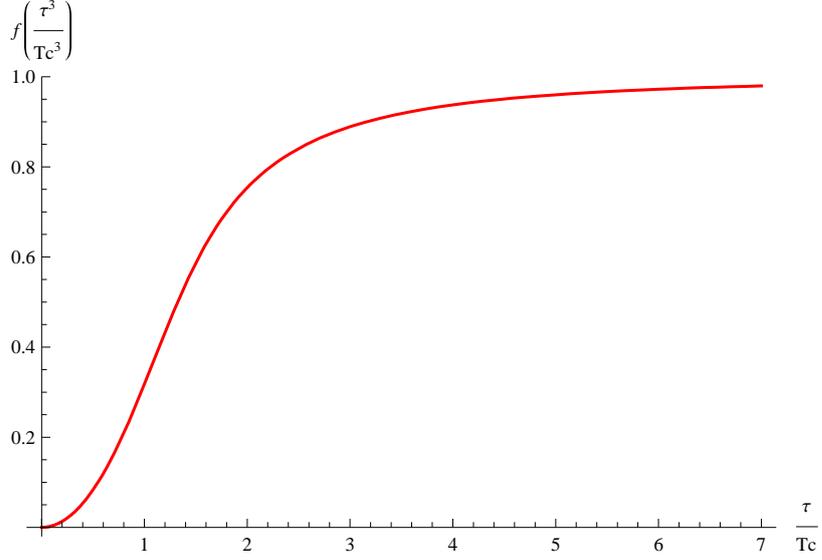


FIG. 3.3 – Courbe illustrant les relations (3.15) et (3.17) pour $q = 0$ avec $\frac{\tau}{Tc}$ en abscisse et l'écart relatif en ordonnées.

avec dans chaque direction $r_\nu = x, y, z$:

$$\begin{aligned}\phi_{s_x}(x) &= c_{s_x} \frac{1}{\sqrt{L_x}} H_{s_x}(x/L_x) e^{-\frac{x^2}{2L_x^2}}, \\ \phi_{s_y}(y) &= c_{s_y} \frac{1}{\sqrt{L_y}} H_{s_y}(y/L_y) e^{-\frac{y^2}{2L_y^2}}, \\ \phi_{s_z}(z) &= c_{s_z} \frac{1}{\sqrt{L_z}} H_{s_z}(z/L_z) e^{-\frac{z^2}{2L_z^2}},\end{aligned}$$

avec $c_{s_\nu} = 1/\sqrt{s_\nu! 2^{s_\nu} \sqrt{\pi}}$, $\nu = x, y, z$ et où les longueurs de confinement selon les axes x, y, z sont données par les expressions suivantes :

$$L_x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}}, \quad L_y = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_y}}, \quad L_z = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}},$$

les fonctions d'ondes sur chaque directions $\nu = x, y, z$ (on note $r_1 = x$, $r_2 = y$, $r_3 = z$ pour les variables de coordonnées) étant orthonormées :

$$\int_{\mathbb{R}} dr_\nu \phi_{s_\nu}(r_\nu) \phi_{s'_\nu}(r_\nu) = \delta_{s_\nu, s'_\nu}.$$

Notons que la partie diagonale de la fonction de corrélation $n(r) \equiv g(r, r)$ est la densité locale de particules.

Revenons maintenant à notre modèle anisotropique exponentielle d'après (3.6), nous avons :

$$\omega_z = \omega_\perp e^{-\omega_c^2/\omega_\perp^2}, \quad \omega_\perp = \omega_x = \omega_y.$$

Ainsi, on peut définir les deux longueurs de confinement du piège :

$$L_\perp = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\perp}}, \quad L_z = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}},$$

avec la propriété d'anisotropie suivante :

$$L_z = L_\perp e^{\alpha^4 L_\perp^4}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}},$$

analogue au cas du gaz dans la boîte avec une différence dans la loi de puissance dans l'exponentielle.

Nous allons calculer les corrélations dans la direction z induites par le quasi-condensat. La différence avec la gaz dans la boîte (c.f. chapitre 2) réside dans l'inhomogénéité du piège harmonique. Ainsi la description locale de la fonction de corrélation (3.18) n'est pas adaptée pour décrire l'ensemble du quasi-condensat distribué dans l'espace tout entier. Par conséquent, nous devons intégrer cette fonction sur l'ensemble de deux points $r = \tilde{r} + \Delta r/2$ et $r' = \tilde{r} - \Delta r/2$ ($\tilde{r} = (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$) situés à une certaine distance fixée $\Delta r = (0, 0, \Delta z)$ pour obtenir un point de vue *global* des corrélations sur l'axe z . Nous obtenons alors la valeur moyenne des corrélation pour une distance Δr :

$$\langle g \rangle(\Delta r) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \tilde{r} g(\tilde{r} - \Delta r/2, \tilde{r} + \Delta r/2) \quad (3.19)$$

3.4.2 Résultats :

Ecrivons la fonction de corrélation comme une somme sur les indices j permettant de la décomposer sur les trois directions :

$$g(r, r') = \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\mu} K_x^{(j)}(x, x') K_y^{(j)}(y, y') K_z^{(j)}(z, z'),$$

avec $K_x^{(j)}(x, x')$, $K_y^{(j)}(y, y')$, $K_z^{(j)}(z, z')$ défini par :

$$\begin{aligned} K_x^{(j)}(x, x') &= \sum_{n_x} \phi_{n_x}(x) \phi_{n_x}(x') e^{-j\beta\hbar\omega_x(n_x + \frac{1}{2})}, \\ K_y^{(j)}(y, y') &= \sum_{n_y} \phi_{n_y}(y) \phi_{n_y}(y') e^{-j\beta\hbar\omega_y(n_y + \frac{1}{2})}, \\ K_z^{(j)}(z, z') &= \sum_{n_z} \phi_{n_z}(z) \phi_{n_z}(z') e^{-j\beta\hbar\omega_z(n_z + \frac{1}{2})}. \end{aligned}$$

Par la formule de Melher dans les trois directions :

$$K_x^{(j)}(x, x') = \frac{1}{\sqrt{\pi(1 - e^{-j\beta\hbar\omega_x/2})}} \exp\left[-\frac{1 - e^{-j\beta\hbar\omega_x/2}}{1 + e^{-j\beta\hbar\omega_x/2}} \frac{(x + x')^2}{L_x^2}\right] \\ \times \exp\left[-\frac{1 + e^{-j\beta\hbar\omega_x/2}}{1 - e^{-j\beta\hbar\omega_x/2}} \frac{(x - x')^2}{L_x^2}\right],$$

$$K_y^{(j)}(y, y') = \frac{1}{\sqrt{\pi(1 - e^{-j\beta\hbar\omega_y/2})}} \exp\left[-\frac{1 - e^{-j\beta\hbar\omega_y/2}}{1 + e^{-j\beta\hbar\omega_y/2}} \frac{(y + y')^2}{L_y^2}\right] \\ \times \exp\left[-\frac{1 + e^{-j\beta\hbar\omega_y/2}}{1 - e^{-j\beta\hbar\omega_y/2}} \frac{(y - y')^2}{L_y^2}\right],$$

$$K_z^{(j)}(z, z') = \frac{1}{\sqrt{\pi(1 - e^{-j\beta\hbar\omega_z/2})}} \exp\left[-\frac{1 - e^{-j\beta\hbar\omega_z/2}}{1 + e^{-j\beta\hbar\omega_z/2}} \frac{(z + z')^2}{L_z^2}\right] \\ \times \exp\left[-\frac{1 + e^{-j\beta\hbar\omega_z/2}}{1 - e^{-j\beta\hbar\omega_z/2}} \frac{(z - z')^2}{L_z^2}\right].$$

Cas $N < N_c$, non condensé avec $\mu < 0$:

Nous pouvons faire l'approximation suivante car nous n'avons pas de condensats et donc tous les niveaux énergies sont de l'ordre de $\mu \neq 0$:

$$\frac{1 - e^{-j\beta\hbar\omega_x/2}}{1 + e^{-j\beta\hbar\omega_x/2}} \simeq j\beta\hbar\omega_x/2 \quad (3.20)$$

On obtient donc :

$$K_x^{(j)}(x, x') \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi j\hbar\omega_x/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}jm\beta\omega_x^2(x + x')^2\right] \exp\left[-2m\frac{(x - x')^2}{j\beta\hbar^2}\right], \quad (3.21)$$

$$K_y^{(j)}(y, y') \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi j\hbar\omega_y/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}jm\beta\omega_y^2(y + y')^2\right] \exp\left[-2m\frac{(y - y')^2}{j\beta\hbar^2}\right], \quad (3.22)$$

$$K_z^{(j)}(z, z') \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi j\hbar\omega_z/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}jm\beta\omega_z^2(z + z')^2\right] \exp\left[-2m\frac{(z - z')^2}{j\beta\hbar^2}\right]. \quad (3.23)$$

Ainsi :

$$g(r, r') = \sum_{l=1}^{\infty} e^{j\beta\Delta\mu} \frac{1}{\sqrt{\pi j\hbar\omega_0/2}^3} \\ \times \exp\left[-jm\beta(\omega_x^2(x + x')^2 + \omega_y^2(y + y')^2 + \omega_z^2(z + z')^2)\right] \exp\left[-2m\frac{(r - r')^2}{j\beta\hbar^2}\right].$$

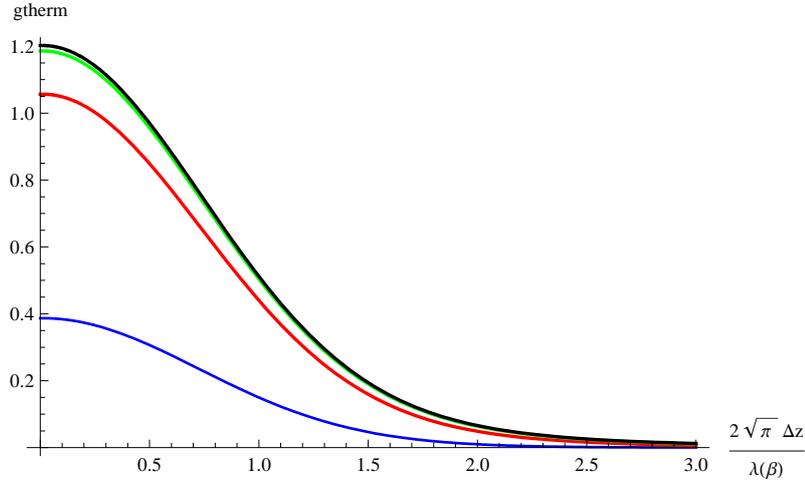


FIG. 3.4 – Allure des fonctions de corrélation (3.24) avec $\hbar\omega_0 = 1$, et $\beta\Delta\mu = 1, 0.1, 0.01, 0.0000001$ respectivement pour les courbes bleue, rouge, verte et noir, $\sqrt{\frac{2m}{\beta\hbar^2}}\Delta z$ est en abscisse. Notons que les deux dernières sont quasi-confondues, ce que l'on peut interpréter comme une saturation de la cohérence du gaz thermique à cause de la valeur proche de zero du potentiel chimique.

Maintenant si on considère que $r = \tilde{r} - \Delta r/2$ $r' = \tilde{r} + \Delta r/2$, où $\Delta r/2 = (0, 0, \Delta z/2)$ et que l'on intègre la fonction de corrélation par rapport \tilde{r} sur l'espace, on obtient une valeur moyenne des corrélation pour la distance Δr :

$$\begin{aligned}
 \langle g \rangle(\Delta r) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\tilde{r} g(\tilde{r} - \Delta r/2, \tilde{r} + \Delta r/2) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^1} d\tilde{x} \int_{\mathbb{R}^1} d\tilde{y} \int_{\mathbb{R}^1} d\tilde{z} \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\mu} \frac{1}{\sqrt{\pi j \hbar \omega_0 / 2}^3} \\
 &\quad \times \exp[-jm\beta(\omega_x^2 \tilde{x}^2 + \omega_y^2 \tilde{y}^2 + \omega_z^2 \tilde{z}^2)] \exp[-2m \frac{(\Delta r)^2}{j\beta\hbar^2}], \\
 &= \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\mu} \frac{1}{j^3 \hbar^3 \omega_0^3} \exp[-2m \frac{(\Delta r)^2}{j\beta\hbar^2}]. \tag{3.24}
 \end{aligned}$$

car $\exp[-jm\beta(\omega_x^2 \tilde{x}^2 + \omega_y^2 \tilde{y}^2 + \omega_z^2 \tilde{z}^2)] \simeq 1$ lorsque les ω_ν , $\nu = x, y, z$ tendent vers zero. Notons que pour la partie non-condensée, nous obtenons une fonction de corrélation d'une forme très similaire au cas du gaz parfait dans une boîte vu dans le chapitre 2, voir la figure 3.4 pour son allure. Pour un Δr très grand, la fonction de corrélation moyenne pour la partie non condensée tend donc vers 0 d'après (3.24) :

$$\lim_{\|\Delta r\| \rightarrow \infty} \langle g \rangle(\Delta r) = 0, N < N_c. \tag{3.25}$$

Cas $N > N_c$, régime condensé

Dans ce régime condensé, le potentiel chimique s'écrit comme $\mu = \epsilon_{000} - \Delta\mu$ et il est solution de l'équation $n > n_c$, où $n = \omega_0^3 N$ et $n_c = \omega_0^3 N_c$. Rappelons que $\Delta\mu$ tend vers zero quand les pulsations tendent vers zero avec différentes asymptotiques en fonction du régime $N_c < N < N_m$ et $N > N_m$.

On peut séparer la fonction de corrélation en trois parties : quasi-condensée, condensée et non condensée :

$$g(r, r') = g_{bec}(r, r') + g_{qbec}(r, r') + g_{therm}(r, r'), \quad (3.26)$$

où nous avons :

$$\begin{aligned} g_{bec}(r, r') &= \frac{\phi_{000}(r)\phi_{000}(r')}{e^{\beta\Delta\mu} - 1}, \\ g_{qbec}(r, r') &= \sum_{s_z} \frac{\phi_{00s_z}(r)\phi_{00s_z}(r')}{e^{\beta(\epsilon_{00s_z} + \Delta\mu)} - 1}, \\ g_{therm}(r, r') &= \sum_{s_x > 0, s_y > 0, s_z} \frac{\phi_{s_x s_y s_z}(x)\phi_{s_x s_y s_z}(x')}{e^{\beta(\epsilon_{s_x s_y s_z} + \Delta\mu)} - 1}, \end{aligned}$$

On prend la même démarche de calcul des corrélation que pour le cas $N < N_c$ en considérant que $r = \tilde{r} - \Delta r/2$ $r' = \tilde{r} + \Delta r/2$, où $\Delta r/2 = (0, 0, \Delta z/2)$ et que l'on integre la fonction de corrélation par rapport \tilde{r} sur l'espace, on obtient une valeur moyenne des corrélations pour la distance Δr .

Pour la partie non condensée $\langle g_{therm} \rangle(r, r')$, étant donné que nous sommes sur les niveaux énergétiques très grands devant le potentiel chimique effectif $\Delta\mu$ (3.4), nous obtenons le même résultat que (3.24) et (3.25) en prenant $\mu = 0$:

$$\langle g_{therm} \rangle(\Delta r) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^3 \hbar^3 \omega_0^3} \exp[-2m \frac{(\Delta z)^2}{j \beta \hbar^2}], \quad N > N_c, \quad (3.27)$$

qui tend vers zero en limite thermodynamique :

$$\lim_{\|\Delta r\| \rightarrow \infty} \langle g_{therm} \rangle(\Delta z) = 0, \quad N < N_c. \quad (3.28)$$

Pour la partie quasi-condensée $\langle g_{qbec} \rangle(r, r')$, nous procédons de la même manière que pour la partie non condensée, en considérant que nous sommes sur des niveaux énergétiques sur l'axe z à l'échelle de $\Delta\mu = \beta^{-1} \exp(-\hbar\beta\omega_z(N - N_c))$ pour $N_c < N < N_m$ (3.4), l'approximation (3.20) reste valide et donc en tenant compte de (3.23) ainsi que du changement d'échelle :

$$\epsilon_{s_z} \mapsto \frac{\epsilon_{s_z}}{\beta\Delta\mu}$$

on obtient :

$$\begin{aligned}
 \langle g_{qbec} \rangle(\Delta r) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \tilde{r} g_{qbec}(\tilde{r} - \Delta r/2, \tilde{r} + \Delta r/2) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^1} d\tilde{z} \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\Delta\mu} \frac{1}{\sqrt{\pi j \hbar \omega_z / 2}} \\
 &\times \exp[-jm\beta(\omega_z^2 \tilde{z})^2 \beta\Delta\mu] \exp[-2m \frac{(\Delta r)^2 \beta\Delta\mu}{j\beta\hbar^2}], \\
 &= \sum_{j=1}^{\infty} e^{j\beta\Delta\mu} \frac{1}{j\hbar\omega_z} \exp[-2m \frac{(\Delta z)^2 \Delta\mu}{j\hbar^2}]. \tag{3.29}
 \end{aligned}$$

et pour sachant que pour $N > N_m$ les niveaux énergétiques sont à l'échelle de $\exp(-\hbar\beta\omega_z(N_m - N_c)) = \exp(-\omega_c^2/\omega_{\perp}^2)$, on trouve, voir figure 3.5 :

$$\langle g_{qbec} \rangle(\Delta r) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{-j \exp(-\omega_c^2/\omega_{\perp}^2)}}{j\hbar\omega_z} \exp[-2m \frac{(\Delta z)^2 \exp(-\omega_c^2/\omega_{\perp}^2)}{j\beta\hbar^2}]. \tag{3.30}$$

Pour la partie condensée, pour $N < N_m$ le nombre de particule dans le mode fondamental étant nul, on trouve zero et pour $N > N_m$ le résultat est évident :

$$\begin{aligned}
 \langle g_{bec} \rangle(\Delta r) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \tilde{r} g_{bec}(\tilde{r} - \Delta r/2, \tilde{r} + \Delta r/2) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d\tilde{r} \phi_{000}(\Delta r) \phi_{000}(-\Delta r) N_{bec} \\
 &= N_{bec} \exp\left(\frac{\Delta z^2}{L_z^2}\right) \\
 &\simeq_{L_z \gg \Delta z^2} N_{bec}, \tag{3.31}
 \end{aligned}$$

pour $N > N_m$.

Dans l'hypothèse où les pulsations du pièges tendent vers zero, c'est à dire dans un régime thermodynamique, nous obtenons ainsi l'expression formelle de la fonction de corrélation moyenne (3.19) (3.26), (3.29), (3.30), (3.31) :

$$\langle g \rangle(\Delta r) \simeq \begin{cases} N_{Qbec} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^3 \hbar^3 \omega_0^3} \exp[-2m \frac{(\Delta r)^2}{j\beta\hbar^2}] & , N_c < N < N_m, \\ N_{bec} + N_{Qbec} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^3 \hbar^3 \omega_0^3} \exp[-2m \frac{(\Delta r)^2}{j\beta\hbar^2}], & N > N_m. \end{cases} \tag{3.32}$$

Dans le membre de droite de (3.32), pour $N_c < N < N_m$, se trouve l'expression explicite de la fonction de corrélation pour la partie quasi-condensée dans le premier terme et pour la partie non condensée dans le deuxième terme et dans le membre de droite de (3.32), pour $N > N_m$, se trouve l'expression explicite de la fonction de corrélation pour la partie condensée dans le premier terme, quasi-condensée dans le deuxième et non condensée dans le troisième. Lorsque Δz^2 est très grand devant $\beta\hbar^2/2m$, la partie non condensée s'annule (3.28) et nous trouvons l'ordre à longue portée à la Penrose et Onsager :

$$\lim_{\|\Delta r\| \rightarrow \infty} \langle g \rangle(\Delta r) = N_0 = N - N_c$$

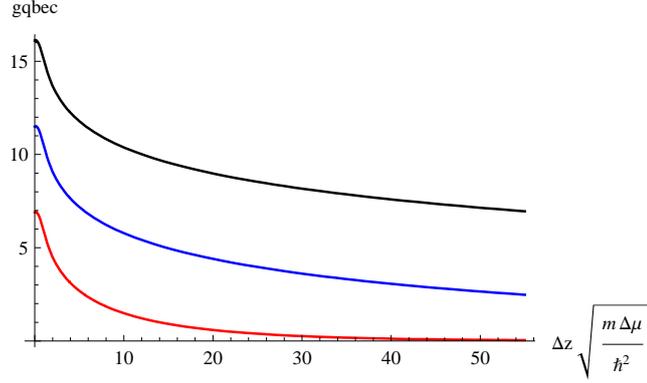


FIG. 3.5 – Allure des fonctions de corrélations (3.30) avec $\hbar\omega_z = 1$, pour $\beta\Delta\mu = 0.001$, 0.0001 , 0.000001 respectivement pour les courbes rouge, bleue et noir, à une échelle de longueur $\Delta z \sqrt{\frac{2m\beta\Delta\mu}{\beta\hbar^2}}$. On remarque par rapport à la figure 3.4 représentant la partie non-condensée que la fonction est beaucoup plus étendue spatialement et a une plus grande amplitude.

3.4.3 Longueur de cohérence

La fonction de corrélation quasi-condensée (3.29) et (3.30) ne s'annule pas nécessairement grâce à la divergence imposée par la somme sur j (comme pour le nombre de particules). Mais la vitesse de croissance vers l'infini de Δz ne peut pas être quelconque à cause de la loi d'échelle de décroissance du potentiel chimique $\Delta\mu$. Ainsi pour ne pas avoir de décroissance exponentielle dans ce terme, nous devons faire un changement d'échelle des termes dans la somme sur j en $j\Delta\mu$ pour $N_c < N < N_m$ et $je^{\omega_c^2/\omega_\perp^2}$ pour $N > N_m$ et ainsi on voit apparaître l'échelle maximale de comportement algébrique des corrélations pour la partie quasi-condensée en :

$$\Delta z \mapsto \Delta z \sqrt{\frac{2m\beta\Delta\mu}{\beta\hbar^2}}, \quad N_c < N < N_m .$$

$$\Delta z \mapsto \Delta z \sqrt{\frac{2me^{\omega_c^2/\omega_\perp^2}}{\beta\hbar^2}}, \quad N > N_m .$$

Nous appelons cette loi d'échelle maximale pour obtenir des corrélations algébriques le *rayon de corrélation* :

$$r_c = \begin{cases} \sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{2m\beta\Delta\mu}}, & N_c < N < N_m . \\ \sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{2me^{\omega_c^2/\omega_\perp^2}}}, & N > N_m . \end{cases} \quad (3.33)$$

défini par rapport à une échelle de fluctuation thermique $\lambda_\beta = \sqrt{2\pi\beta/m}$. Le potentiel chimique effectif $\Delta\mu$ est donnée par $\beta^{-1}e^{\hbar\beta\omega_z(N-N_c)}$ pour $N_c < N < N_m$

et par $1/(\beta(N - N_m))$, pour $N > N_m$. Ainsi on trouve un rayon de corrélation très grand devant les fluctuations thermiques contrairement au régime non condensé lorsque $N < N_c$ où r_c et λ_β sont du même ordre.

Mais il est intéressant de définir une longueur analogue par rapport à une échelle de longueur de confinement du piège pour se représenter spatialement la cohérence du système. Ainsi nous définissons la *longueur de cohérence* par rapport à la longueur de confinement radiale L_\perp :

$$\frac{L_c}{L_\perp} = \frac{r_c}{\lambda_\beta}, \quad (3.34)$$

ce qui nous donne, voir figure 3.7 :

$$\frac{L_c}{L_\perp} = \left(\frac{L_z}{L_\perp} \right)^{\gamma(T)}, \quad (3.35)$$

et en vertu des expressions (3.35) nous trouvons :

$$\begin{aligned} \gamma(T) &= \frac{\hbar\beta\omega_0^3}{\omega_c^2}(N - N_c), \quad N_c < N < N_m, \\ &= \frac{\hbar\beta\omega_0^3}{\omega_c^2}(N_m - N_c), \quad N > N_m. \end{aligned}$$

En utilisant les équations (3.9) and (3.10) reliant respectivement le nombre de particule N avec les températures critiques T_c , T_m et les nombres critiques N_c , N_m avec la température T , on trouve la dépendance explicite en température de l'exposant $\gamma(T)$, voir figure 3.6 :

$$\gamma(T) = \begin{cases} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \left(\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 - 1\right), & T_m < T < T_c. \\ 1, & T \leq T_m. \end{cases} \quad (3.36)$$

La fonction de corrélation peut-être étudiée expérimentalement par des observations de contraste de franges sur l'ensemble du condensat par interférométrie atomique [16], voir aussi le chapitre 13, *Interference and correlations*, de [19]. Ainsi notre longueur de cohérence formellement défini comme l'échelle maximale d'extension spatiale de la fonction de corrélation, peut s'interpréter comme la longueur maximale d'observation de franges d'interférence dans l'expérience envisagée. Cette interprétation est similaire à la définition des expérimentateurs pour la longueur de cohérence, ce qui donne pour nos relations formelles un statut de prédictions théoriques pour des investigations observationnelles futures.

3.5 Perspectives

Nous proposons une étude expérimentale d'un gaz de Bose dans un piège harmonique quasi-uni-dimensionnel avec la condition de très faibles interactions (à l'opposé

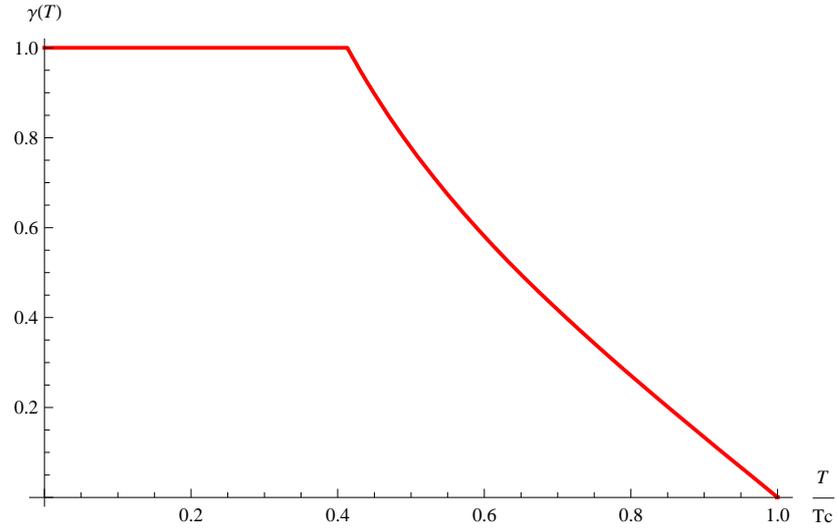


FIG. 3.6 – Courbe illustrant l'exposant (3.36) avec $\frac{T}{T_c}$ en abscisse et $\frac{T_c}{\tau} = \frac{2}{3}$ ce qui nous donne un écart relatif entre les deux densités critiques de 0.587, voir relation 3.15 et la figure 3.3

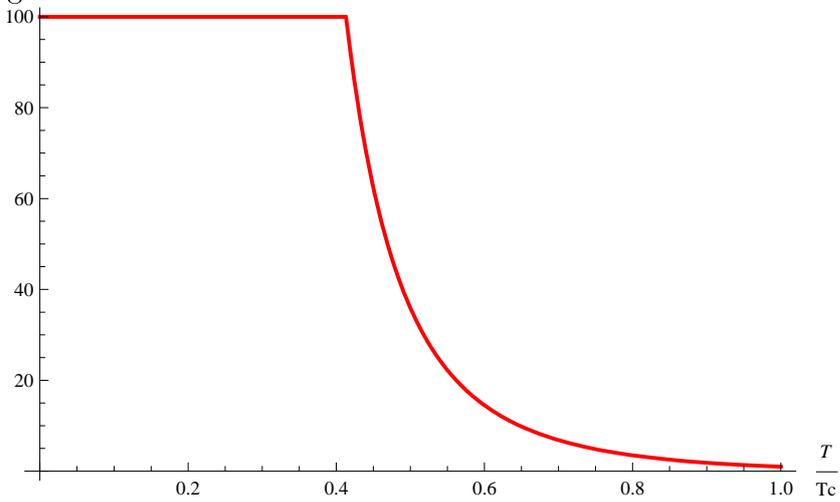


FIG. 3.7 – Courbe illustrant la relation (3.35) avec $\frac{T}{T_c}$ en abscisse et $\frac{T_c}{\tau} = \frac{2}{3}$, pour un rapport d'aspect $\lambda = \frac{L_z}{L_\perp} = 100$

de Thomas-Fermi régime [20], voir aussi le chapitre 15, *lower dimensions*, de [19]), afin de vérifier l'effet de la géométrie sur l'énergie cinétique et sur les propriétés de cohérence du condensat entre ces deux points critiques. Notons que les prochains travaux porteront sur la mise en oeuvre des interactions entre les particules et ses effets sur la seconde température critique comme c'est le cas pour la première température critique [65].

Chapitre 4

Analogie polymères et cycles de bosons : étude de la seconde transition

A mathematician is a person who can find analogies between theorems ; a better mathematician is one who can see analogies between proofs and the best mathematician can notice analogies between theories. One can imagine that the ultimate mathematician is one who can see analogies between analogies.

Stefan Banach, in "Analogies between analogies" the mathematical reports of S.M. ULAM and his Los Alamos collaborators.

4.1 Introduction

R.Feynman en 1953 [8] introduit la notion de cycles dans le gaz de Bose en réécrivant la fonction de partition en se basant sur les permutations cycliques et la formulation par intégrales de chemin de la mécanique quantique adaptée pour la mécanique statistique quantique. Il établit un critère de condensation de Bose-Einstein dans sa formulation, énoncé comme l'apparition de cycles infinis de bosons et tenta de comprendre sous certaines approximations le lien de celui-ci avec le point critique de l'Helium à la température T_λ en dessous de laquelle le liquide d' ^4He devient superfluide. Le critère de Penrose et Onsager, formulé en 1956 [9], est considéré comme le critère de condensation usuel, mais il est prouvé depuis 2002 [13] que pour le gaz parfait de bosons le critère de condensation est équivalent à l'apparition de cycles infinis et aussi dans certains cas de gaz de Bose en interactions [42]. Pour le modèle Bose-Hubbard avec une interaction corps dur, les cycles ont aussi été étudiés mais il a été montré que dans [66] qu'il peut exister des cycles infinis pour un domaine de densité de particules mais la densité de particules dans les cycles infinis est de valeur différente de l'ordre à longue portée. Un modèle de gaz de cycles en interaction [67] permet de calculer le décalage de la température critique de condensation. Une autre étude intéressante concerne l'analogie entre le gaz de Bose (vue en terme de cycle) et un gaz de polymère classique [35].

Récemment [14], une nouvelle approche d'échelle, par analogie avec l'approche de P.G.de Gennes [38] pour le gaz de polymère classique, a été proposée pour étudier le gaz de cycles de bosons, pour établir un contact avec la classification des condensats de Bose-Einstein généralisés [27], [28] (le condensat peut se répartir dans plusieurs niveaux d'énergie proches du niveau fondamental). Ce concept de condensation généralisé permet notamment d'étudier le comportement du condensat dans des milieux anisotropes. Dans des milieux exponentiellement aplatis, dit quasi-bi-dimensionnels (quasi-2D), on a découvert [27] (récemment revisité [30]) l'existence d'une seconde transition pour une seconde densité critique qui sépare un régime de quasi-condensat pour lequel le condensat se répartit sur une bande d'énergie autour du niveau fondamental et un régime de coexistence entre ce quasi-condensat saturé et un condensat dit usuel sur le niveau fondamental.

Le but de ce chapitre est d'étudier l'effet de la géométrie sur la longueur des longs cycles de bosons et de montrer qu'il existe une seconde transition dans la formulation des cycles de bosons qui sépare un régime de croissance des cycles mésoscopiques (longs mais non-macroscopiques) et un régime d'apparition de cycles longs macroscopiques qui coexistent avec le gaz de cycles mésoscopiques saturé. Nous discuterons ainsi les possibles analogies avec un gaz de polymères classiques idéal dans un milieu quasi-2D exponentiellement anisotropes.

4.2 Gaz de cycles de Bose

Rappelons brièvement la notion de *cycles de bosons* ou *polymères bosoniques* apparaissant dans la réécriture de la fonction de partition. Considérons un gaz parfait de bosons de masse m , dans une boîte $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ de volume V , décrit dans l'ensemble grand-canonique (Λ, β, μ) , où $\beta = 1/k_B T$ avec k_B la constante de Boltzmann, T la température et μ le potentiel chimique. L'hamiltonien quantique pour un boson est $H_\Lambda^{N=1} = -\hbar^2 \Delta / 2m$ avec les conditions de Dirichlet. Les fonctions d'ondes par particule associée aux modes $k = (\pi n_1 / L_1, \pi n_2 / L_2, \pi n_3 / L_3)$, $n_\nu \in \mathbb{N}^*$ sont données par :

$$\psi_k(x) = \prod_{\nu=1}^3 \sqrt{\frac{2}{L_\nu}} \sin(k_\nu x_\nu),$$

associées aux valeurs propres de $H_\Lambda^1 \epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$.

D'après le principe d'indiscernabilité bosonique, les états pour N particules identiques associées à un ensemble de modes $\mathbf{k} = (k^{(1)}, \dots, k^{(N)})$ sont donnés par la symétrisation du produit des fonctions d'onde associées à chaque modes de \mathbf{k} : $\Psi_{\mathbf{k}}(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}) = C_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\pi \in S_N} \prod_{i=1}^N \psi_{k^{(\pi(i))}}(x^{(\pi(i))})$ où π est un élément du groupe des permutations S_N et $C_{\tilde{\mathbf{k}}} = 1 / \sqrt{N! \prod_k N_k}$ est la facteur de normalisation.

Ainsi on peut écrire la fonction de partition canonique en tenant compte de cet

écriture, voir le chapitre 1, [14], [12], [13], [42], [43] :

$$Z_{\Lambda}^N(\beta) = \sum_{\{n_j\}_1^N, \sum_j j n_j = N} \prod_{j=1}^N \frac{1}{n_j!} \left(\frac{1}{j} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_k} \right)^{n_j}.$$

Du coup on a réécrit la fonction de partition canonique en faisant apparaître de nouveaux objets grace aux cycles de permutation : des "polymères bosoniques" [43] ou cycles de Feynman [12], de taille j (nombre de bosons) et d'énergie $j\epsilon_k = \hbar^2 \frac{(jk)^2}{2jm}$, et donc ce polymère bosonique a une impulsion jk et une masse jm .

On écrit maintenant la fonction de partition grand-canonique, voir chapitre 1, [14], [12], [13], [42], [43] :

$$\Xi_{\Lambda}(\beta, \mu) = \prod_{j=1}^{\infty} \exp \left(\frac{1}{j} e^{j\beta\mu} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_k} \right),$$

ce qui nous donne une notion de densité de particules dans un polymère de taille j [14], [12], [13], [42], [43] :

$$\rho_{\Lambda,j}(\beta, \mu) = \frac{1}{V} e^{j\beta\mu} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_k}, \quad (4.1)$$

avec la densité totale de particule égale à la somme sur toutes les longueurs de cycles :

$$\rho_{\Lambda}(\beta, \mu) = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_{\Lambda,j}(\beta, \mu).$$

Ce qui intriguait R.Feynman [8] en 1953 c'est justement cette réécriture de la fonction de partition mais pour le gaz d'hélium qui est un gaz en forte interaction. Il comptait donc discuter le lien entre la condensation de Bose-Einstein et la transition lambda de l'hélium avec quelques approximations justifiées intuitivement par cette nouvelle vision en terme de cycles de bosons et donc de gaz de cycles de bosons. L'idée de Feynman c'est que la condensation de Bose-Einstein pourrait être équivalente à la formation de cycles infinis de bosons en limite thermodynamique. Le critère de condensation appelé ODLRO, de Penrose et Onsager de 1956 [9], s'est avéré en fait plus juste et valable pour les cas en interactions. D.Ueltschi d'ailleurs revient sur cette remarque en 2006 [12] en proposant un phénomène de transition cycles finis/infinis sans existence de corrélations à longue portée. A.Sütö en 1993 puis en 2002 [13] revint au cas du gaz parfait pour discuter la validité du critère d'existence de cycles infinis dans ce cas et montra sa validité pour le cas isotrope ($\Lambda = L^3$), d'après (1.20) :

$$\rho_{\text{short}}(\beta, \mu) = \lim_{M \uparrow \infty} \lim_{L \uparrow \infty} \sum_{j=1}^M \frac{1}{V} e^{j\beta\mu} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_k} \quad (4.2)$$

$$= \frac{g_{3/2}(e^{\beta\mu})}{\lambda_{\beta}^3} < \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_{\beta}^3} \equiv \rho_c(\beta). \quad (4.3)$$

En 2009, [14] j'ai établi l'équivalence entre la notion de condensation de Bose-Einstein généralisée introduite par M.van den Berg, J.Lewis, J.Pulé en 1986 et l'existence de cycles infinis et d'ODLRO pour le gaz parfait dans des boîtes anisotropes. Ainsi l'équation (4.2) reste vraie pour $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ avec $L_i = L_i(L)$, où $L \in \mathbb{R}^{+,*}$ est un paramètre d'échelle. Ce travail, qui généralise celui de Sütö pour le cas cubique, est important car les recherches expérimentales et théoriques sur le gaz de Bose en milieu anisotrope sont très actives. Mais ce n'est pas tout, dans [14], un lien entre les différents types de condensats de Bose-Einstein (occupation macroscopique ou non des états quantiques condensés) a été établi avec la taille des cycles longs de polymères de bosons formant le condensat et avec la longueur de cohérence des condensats. Ceci a permis d'établir un lien entre différentes terminologies utilisées dans les communautés de physiciens théoriciens, expérimentateurs et mathématiciens. En effet un condensat sur l'état fondamental (généralisé type I) ou fragmenté (généralisé type II) possède une longueur de cohérence occupant toute la boîte et formé par un ensemble de cycles *macroscopiques* alors qu'un quasi-condensat (généralisé type III) possède une longueur de cohérence plus petite que la taille de la boîte et il est formé par un ensemble de cycles *mésoscopiques*.

Ensuite dans un récent article, avec V.Zagrebnoy nous avons repris le problème du gaz de Bose parfait dans un modèle de boîte anisotrope introduit par van den Berg en 1983 [27]. Soit une boîte $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$, avec $L_1 = L_2 = Le^{\alpha L}$, $L_3 = L$. Il est présenté dans le chapitre 2 (et 3 pour un piège harmonique quasi-1D) une nouvelle transition dans le gaz de Bose qui sépare deux régimes : quasi-1/2D et 3D à une densité critique $\rho_m(\beta)$ supérieure à la densité critique de condensation $\rho_c(\beta)$. Dans le premier régime $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$, on a un quasi-condensat (generalized BEC type III) dont la longueur de cohérence dépend de la densité et de la température $L_c = Le^{\lambda(\beta)^2(\rho - \rho_c(\beta))L/2} \ll L_1$. Dans le second régime $\rho > \rho_m(\beta)$, on a apparition d'un condensat usuel (macroscopique) sur l'état fondamental qui coexiste avec le quasicondensat saturé de longueur de cohérence constant $L_c = L_1$ et de densité diminuant avec une diminution de température $\sim T$. Il reste bien sûr à discuter cette transition en présence d'interactions. Mais dans un premier temps, il est intéressant de savoir quelle est son image en terme de cycles. Dans [14] il est donnée un premier élément de réponse basé sur l'analogie avec la relation d'échelle entre la longueur de corrélation et la taille des polymères classiques linéaires étudiés par P.-G de Gennes [38]. En effet, il y a une relation de scaling entre la longueur de cohérence quantique r avec la taille n des cycles longs donnée par $r = \lambda(\beta)n^{1/2}$ ($\lambda(\beta)$ est la longueur thermique de de Broglie) tout comme la loi de scaling pour *les chaînes idéales* reliant la taille des chaînes R au nombre de monomère N : $R = aN^{1/2}$ (a est la longueur effective du monomère). Heuristiquement on peut donc penser que dans le régime quasi-2D on a des "polymères" (cycles) de bosons mésoscopiques (dont la taille peut-être calculer avec la formule du dessus) et dans le régime 3D on a une coexistence entre des polymères de bosons macroscopiques et mésoscopiques.

4.3 Rappels sur la seconde transition

Il est bien connu depuis 1925 [1] que pour un gaz parfait de bosons identiques de masse m dans une boîte cubique $\Lambda = L^3$ décrit par l'ensemble grand-canonique (V, T, μ) avec T la température et μ le potentiel chimique, il existe une densité critique de saturation du gaz thermique $\rho_c = \zeta(3/2)/\lambda_\beta^3$, où $\lambda_\beta = \hbar\sqrt{2\pi\beta/m}$ est la longueur thermique et $\beta = 1/k_B T$. L'hypothèse d'A.Einstein reprise en 1938 [4] par F.London suppose que pour une densité de particule ρ supérieure à la densité critique ρ_c , le surplus de particules $\rho - \rho_c$ se met dans l'état fondamental de mode $k = 0$. Ainsi on note que $\rho_{k=0} = \rho - \rho_c$ pour $\rho > \rho_c$. Cependant cet argument de population macroscopique de l'état fondamental dépend drastiquement de la géométrie de la boîte. C'est ce qu'à d'abord découvert H.Casimir [25] en 1968 pour une certaine géométrie anisotrope et ce qui a motivé les travaux de M.van den Berg, J.Lewis et J.Pulé à partir de 1981 [26], [28], [29]. Ces derniers ont généralisé le concept de condensation de Bose-Einstein en définissant la densité de condensat en limite thermodynamique pour un gaz de Bose parfait dans une boîte parallélépipédique quelconque $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ de volume $|\Lambda| = V$:

$$\rho_0 = \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{\|k\| \leq \eta} \rho_k = \rho - \rho_c.$$

Cette définition inclut toutes les possibilités de provenance d'un condensat, donnée ici d'après [28] et revisitée [14] en référence aux terminologies récentes [33] :

(i) Le condensat conventionnel ou usuel [14], [33] formé par l'état fondamental (type I [28]).

(ii) Le condensat fragmenté [14], [33] si le condensat généralisé est réparti sur un ensemble (fini/infini) de modes macroscopiquement occupés dans une bande d'énergie proche du mode fondamental i.e. $N_0 = \sum_{k \leq k_c} N_k$, avec $N_k = O(N)$ (type I/II [28]).

(iii) Le quasi-condensat [14], [33] si le condensat généralisé est réparti sur un ensemble de modes mésoscopiquement occupés dans une bande d'énergie proche du mode fondamental i.e. $N_0 = \sum_{k \leq k_c} N_k$, avec $N_k = O(N^\delta)$, $\delta < 1$ (type III [28]).

En 1983 [27], van den Berg proposa un modèle de boîte tri-dimensionnelle exponentiellement anisotrope dans deux directions pour définir une seconde densité critique ρ_m séparant un régime de condensat généralisé de type III (pour $\rho_c < \rho < \rho_m$) vers un régime de condensat généralisé de type I (pour $\rho > \rho_m$). Récemment, nous avons réétudié ce modèle [30] que nous appelons quasi-bi-dimensionnel et nous avons montré qu'il s'agit d'une transition entre deux régimes : de quasi-condensat et de coexistence entre un régime de condensat conventionnel et de quasi-condensat, en montrant notamment que la seconde densité critique ρ_m correspond à une densité de saturation du gaz quasi-condensée de manière similaire à la saturation du gaz thermique pour ρ_c . De plus nous avons calculé la seconde température critique analogue et déterminé les fractions condensées modifiées. Puis nous avons calculé les effets de cette transition sur la longueur de cohérence pour ces deux régimes de condensats généralisés.

4.4 Seconde transition pour le gaz de cycles de bosons

Nous allons reprendre le modèle quasi-2D de [30] exprimé pour le gaz polymères de bosons.

Considérons un gaz parfait de bosons grand-canonique dans une boîte parallélépipédique $\Lambda = L_1(L) \times L_2(L) \times L_3(L)$, où L est un paramètre d'échelle dont chaque longueur de la boîte est fonction, le volume de la boîte est $|\Lambda| = V_L = L_1(L)L_2(L)L_3(L)$. Pour ce type de géométrie qui tient compte de toutes les anisotropies possibles, la limite thermodynamique s'obtient lorsque le paramètre L tend vers l'infini, nous noterons " $\lim_{L \rightarrow \infty}$ " la limite thermodynamique.

4.4.1 Transition de l'échelle pour les cycles longs

Rappelons tout d'abord d'après les définitions 1.9 et 1.10 du premier chapitre, les notions de cycles mésoscopiques et macroscopiques. Nous changeons quelques notations ici pour l'adapter à notre modèle anisotrope. On dit qu'il existe dans le gaz de Bose des cycles longs à l'échelle $\xi(L)$ (où $\xi(L)$ est une fonction monotone croissante qui tend vers l'infini quand L tend vers l'infini), s'il existe deux nombres réels positifs c et d tel que :

$$\lim_{L \uparrow \infty} \sum_{j=c\xi(L)}^{d\xi(L)} \rho_{\Lambda,j}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)) > 0.$$

Ainsi la densité totale de particules dans les cycles longs à l'échelle $\xi(L)$ est donnée par :

$$\rho_{\text{long}}(\beta, \rho | \xi) := \lim_{c \downarrow 0; d \uparrow \infty} \lim_{L \uparrow \infty} \sum_{j=c\xi(L)}^{d\xi(L)} \rho_{\Lambda,j}(\beta, \bar{\mu}_{\Lambda}(\beta, \rho)).$$

De cette manière, nous obtenons une classification des différents types de cycles longs pouvant exister :

- Les cycles sont macroscopiques si la fonction $\xi(L) = O(N)$, c'est à dire que $\xi(L)/V_L \rightarrow C > 0$ lorsque $L \rightarrow \infty$.

- Les cycles sont mésoscopiques si la fonction $1 \ll \xi(L) \ll N$, c'est à dire que $\xi(L) \rightarrow \infty$ lorsque $L \rightarrow \infty$ alors que $\xi(L)/V_L \rightarrow 0$.

Revenons notre modèle de boîte quasi-2D exponentiellement anisotrope $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ avec $L_1 = L_2 = Le^{\alpha L}$, $L_3 = L$. Ce qui donne, lorsque $\mu_L = \beta^{-1} e^{-\lambda_{\beta}^2(\rho - \rho_c(\beta))L}$, une somme sur un ensemble de modes du plan $(k_1, k_2, 0)$ dans une "couronne" avec un rayon à l'échelle $k_c(L)$:

$$k_c(L) = \frac{2m}{\hbar^2} e^{-\frac{\lambda_{\beta}^2}{2}(\rho - \rho_c)L}, \quad \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$$

que nous avons trouvé dans la section 2.3 :

$$\begin{aligned}
 & \lim_{a \downarrow 0; b \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{ak_c(L) \leq \|k\| \leq bk_c(L)} \rho_\Lambda(k) \\
 = & \lim_{a \downarrow 0; b \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\Delta_L(\beta, \rho)}{L} \sum_{j=0}^{\infty} e^{-j\beta\Delta_L(\beta, \rho)} \int_a^b \frac{dk_1}{(2\pi)} e^{-j\beta\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_L(\beta, \rho)} \int_a^b \frac{dk_2}{(2\pi)} e^{-j\beta\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_L(\beta, \rho)} \\
 = & \lim_{a \downarrow 0; b \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j\lambda_\beta^2} e^{-j\beta\Delta_L(\beta, \rho)} (\operatorname{erf}(b) - \operatorname{erf}(a)) \\
 = & \rho_{qbec}(\beta) \tag{4.4}
 \end{aligned}$$

où $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^x dx' e^{-x'^2}$, $x \in \mathbb{R}^1$.

Sachant que, d'après le théorème 1.3, la valeur de la densité du quasi-condensat ou condensat généralisé de type III est égale à la valeur de densité de particules dans les cycles longs, nous allons donc chercher l'échelle de longueur des cycles qui nous permet de trouver ρ_{qbec} en restreignant la somme dans la dernière équation (4.4). Par un changement d'échelle dans l'équation (4.4), on introduit :

$$\xi(L) = \frac{1}{\beta\Delta_L(\beta, \rho)}$$

comme échelle de cycles longs.

D'après l'équation donnant la densité de particules dans les cycles de taille j (4.1), on introduit la densité de particules dans un mode k et dans les cycles de longueur j :

$$\rho_\Lambda(j; k) = \frac{1}{V_L} e^{j\beta\mu_L} e^{-j\beta\epsilon_\Lambda(k)}$$

Ainsi nous devons calculer la densité de bosons dans les modes k à l'échelle $k_c(L)$ et dans les cycles longs à l'échelle $\xi(L)$, d'après (4.4) et avec la même méthode que les démonstration des théorèmes 1.4, 1.5, 1.6 du chapitre 1 nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \rho_{\text{meso}}(\beta, \rho) & \equiv \lim_{c \downarrow 0; d \uparrow \infty} \lim_{a \downarrow 0; b \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{j=c\xi(L)}^{d\xi(L)} \sum_{ak_c(L) \leq \|k\| \leq bk_c(L)} \rho_L(j, k) \\
 & = \lim_{c \downarrow 0; d \uparrow \infty} \lim_{a \downarrow 0; b \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{j=c\xi(L)}^{d\xi(L)} \sum_{ak_c(L) \leq \|k\| \leq bk_c(L)} \frac{1}{V_L} e^{-j\beta\Delta_L(\beta, \rho)} e^{-j\beta\epsilon_\Lambda(k)} \\
 & = \lim_{c \downarrow 0; d \uparrow \infty} \lim_{a \downarrow 0; b \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{ak_c(L) \leq \|k\| \leq bk_c(L)} \frac{1}{V_L} \frac{e^{-c} - e^{-d}}{e^{\beta(\beta\epsilon_\Lambda(k) + \Delta_L(\beta, \rho))} - 1} \\
 & = \lim_{a \downarrow 0; b \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{ak_c(L) \leq \|k\| \leq bk_c(L)} \frac{1}{V_L} \frac{1}{e^{\beta(\beta\epsilon_\Lambda(k) + \Delta_L(\beta, \rho))} - 1} \\
 & = \rho_{qbec}(\beta, \rho). \tag{4.5}
 \end{aligned}$$

Nous pouvons étendre notre raisonnement au cas $\rho > \rho_m(\beta)$ pour la densité quasi-condensée dans les cycles longs, on trouve avec les mêmes arguments, sachant que la localisation en impulsion est $k_m(L) = \lambda_\beta^{-1} e^{-\alpha L}$, que l'échelle des cycles longs est donnée par la fonction :

$$\xi(L) = e^{2\alpha L}$$

Il est à noter que pour $\rho > \rho_m(\beta)$, l'échelle des cycles longs ne va pas varier, le paramètre dans l'exponentielle restera 2α ce qui donne des cycles mésoscopiques dont la densité sature à la valeur :

$$\rho_{\text{meso}}(\beta, \rho) = \rho_m(\beta) - \rho_c(\beta), \quad \rho > \rho_m(\beta).$$

Pour augmenter la densité de particules au delà de $\rho_m(\beta)$, il suffit de former des cycles macroscopiques correspondant à une densité de particules dans l'état fondamentale (la démonstration est similaire à celle du théorème 1.4 du chapitre 1) :

$$\rho_{\text{macro}}(\beta, \rho) = \rho(\beta) - \rho_m(\beta), \quad \rho > \rho_m(\beta).$$

En définitive nous obtenons :

$$\rho_{\text{longs}}(\beta, \rho) = \rho_{\text{meso}}(\beta, \rho) + \rho_{\text{macro}}(\beta, \rho), \quad \rho > \rho_c(\beta), \quad (4.6)$$

avec :

$$\rho_{\text{meso}}(\beta, \rho) = \begin{cases} \rho - \rho_c(\beta), & \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta) \\ \rho_m(\beta) - \rho_c(\beta), & \rho > \rho_m(\beta) \end{cases} \quad (4.7)$$

$$\rho_{\text{macro}}(\beta, \rho) = \begin{cases} 0, & \rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta) \\ \rho - \rho_c(\beta), & \rho > \rho_m(\beta) \end{cases} \quad (4.8)$$

Comme ce que nous avons remarqué dans la section 2.3 du chapitre 2, ce qui est surprenant ici c'est que l'on a une transition, non pas de phase car on reste dans un régime condensé, mais une *transition d'échelle* entre différents types de polymères bosoniques, caractéristiques des différents condensats. On a ainsi, voir figure 4.1 :

- Un régime de *cycles mésoscopiques* pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$
- Un régime de *coexistence cycles macroscopiques* et de *cycles mésoscopiques* pour $\rho > \rho_m(\beta)$

4.4.2 Rayon de corrélation des cycles de bosons

L'idée de cette section est d'établir le lien entre la fonction de corrélation calculée dans la section 2.6 du chapitre 2, avec la répartition des densités condensées dans les cycles longs mésoscopiques et macroscopiques. Intuitivement on se doute que les deux parties hors diagonales de la fonction de corrélation responsables de l'ordre à longue portée correspondent aux deux hiérarchies de tailles de cycles longs dans le condensat. Ainsi pour $\rho > \rho_c(\beta)$ avec $\mu_L(\beta, \rho) = \inf_k \varepsilon_L(k) - \Delta_L(\beta, \rho)$, nous avons :

$$\sigma_L(x, x') = \sigma_{L, \text{bec}}(x, x') + \sigma_{L, \text{qbec}}(x, x') + \sigma_{L, \text{therm}}(x, x')$$

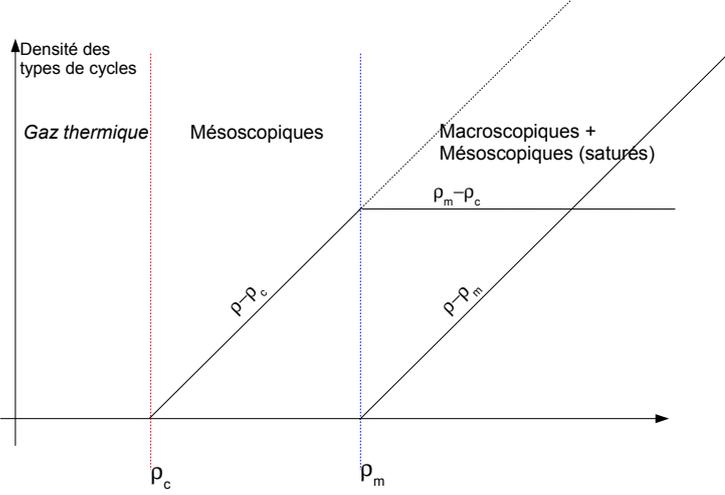


FIG. 4.1 – Courbes de densités de particules dans cycles longs, mésoscopiques et macroscopiques en fonction de la densité totale de particules

où $\sigma_{L,bec}(x, x')$ est la partie corrélation du condensat usuel sur le modes fondamental :

$$\sigma_{L,bec}(x, x') := \frac{\psi_0^*(x)\psi_0(x')}{e^{\beta\Delta_L(\beta,\rho)} - 1},$$

$\sigma_{L,qbec}(x, x')$ est la partie corrélation du quasi-condensat dans le plan $(k_1, k_2, \pi/L_3)$ (sauf sur le mode fondamental) :

$$\sigma_{L,qbec}(x, x') := \sum_{k=(k_1, k_2, \pi/L_3)} \frac{\psi_k^*(x)\psi_k(x')}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k)+\Delta_L(\beta,\rho))} - 1},$$

et $\sigma_{L,therm}(x, x')$ est la partie du gaz thermique, en dehors des condensats :

$$\sigma_{L,therm}(x, x') := \sum_{k \neq (k_1, k_2, \pi/L_3)} \frac{\psi_k^*(x)\psi_k(x')}{e^{\beta(\epsilon_\Lambda(k)+\Delta_L(\beta,\rho))} - 1}.$$

Nous allons calculer la fonction de corrélation en limite thermodynamique, en fixant les deux points $x_\nu = \tilde{x}_\nu + L_\nu/2$ et $x'_\nu = \tilde{x}'_\nu + L_\nu/2$. Pour la partie thermique, comme nous l'avons calculé dans la section 2.6 du chapitre 2, on trouve :

$$\sigma_{therm}(x, x') = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{j\beta\mu}}{j^{3/2}\lambda_\beta^3} e^{-4\pi\|\tilde{x}-\tilde{x}'\|^2/j\lambda_\beta^2},$$

où $\mu = \lim_{L \rightarrow \infty} \mu_L(\beta, \rho)$ est strictement négatif pour $\rho < \rho_c(\beta)$ et nul pour $\rho > \rho_c(\beta)$. Nous pouvons réécrire cette somme comme une somme sur les densités de

particules dans cycles courts pondérés par un facteur gaussien de décroissance due aux corrélations :

$$\begin{aligned}\sigma_{courts}(x, x') &:= \lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^M \rho_L(j) e^{-4\pi \|\tilde{x} - \tilde{x}'\|^2 / j \lambda_\beta^2} \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \rho(j) e^{-4\pi \|\tilde{x} - \tilde{x}'\|^2 / j \lambda_\beta^2} = \sigma_{therm}(x, x'),\end{aligned}$$

où la densité de particules dans les cycles courts de taille j est :

$$\rho(j) = \frac{e^{j\beta\mu}}{j^{3/2} \lambda_\beta^3}$$

Nous obtenons pour le condensat usuel :

$$\begin{aligned}\sigma_{bec}(x, x') &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sigma_{L,bec}(x, x') \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\psi_0^*(x) \psi_0(x')}{e^{\beta \Delta_L(\beta, \rho)} - 1}, \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{V_L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j \Delta_L(\beta, \rho)} \prod_{\nu=1}^3 2 \cos(\pi n_\nu x_\nu / L_\nu) \cos(\pi n_\nu x'_\nu / L_\nu), \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{8}{V_L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j \Delta_L(\beta, \rho)} = 8(\rho - \rho_m(\beta)),\end{aligned}$$

car la dernière partie avec les fonctions cosinus tend vers l'unité en limite thermodynamique. Pour $\rho < \rho_m(\beta)$, on trouve que cette quantité s'annule car la densité de condensat est nulle. Pour $\rho > \rho_m(\beta)$, nous pouvons procéder au changement d'échelle pour les indices j de la somme qui correspond à la somme sur les tailles de cycles, en prenant $j / ((\rho - \rho_m(\beta)) V_L)$. On peut donc calculer la fonction de corrélation correspondant à la partie cycles macroscopiques en restreignant la somme présente dans le dernier calcul sur les cycles macroscopiques $j : c_1(\rho - \rho_m(\beta)) V_L \rightarrow c_2(\rho - \rho_m(\beta)) V_L$:

$$\begin{aligned}\sigma_{macro}(x, x') &= \lim_{c_1 \downarrow 0; c_2 \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{8}{V_L} \sum_{j=c_1(\rho - \rho_m(\beta)) V_L}^{c_2(\rho - \rho_m(\beta)) V_L} e^{-j \beta \Delta_L} \prod_{\nu=1}^3 2 \cos(\pi n_\nu \tilde{x}_\nu / L_\nu) \cos(\pi n_\nu \tilde{x}'_\nu / L_\nu), \\ &= \lim_{c_1 \downarrow 0; c_2 \uparrow \infty} 8(\rho - \rho_m(\beta)) \int_{c_1}^{c_2} d\xi e^{-\xi} = \sigma_{bec}(x, x').\end{aligned}$$

Maintenant calculons la fonction de corrélation du quasi-condensat. Pour $\rho_c(\beta) < \rho < \rho_m(\beta)$, d'après l'équation (2.37) on a :

$$\begin{aligned}\sigma_{qbec}(x, x') &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2}{L} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j \beta \Delta_L(\beta, \rho)} \frac{1}{j \lambda_\beta^2} \\ &= 2(\rho - \rho_c(\beta)),\end{aligned}$$

où $\Delta_L(\beta, \rho < \rho_m(\beta)) = \beta^{-1} e^{-\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c(\beta))L}$. On peut restreindre la somme sur les cycles en procédant au changement de variable $j \mapsto j\Delta_L(\beta, \rho)$. Ainsi nous calculons la somme sur les cycles mésoscopiques $j : c_1(\beta\Delta_L(\beta, \rho))^{-1} \rightarrow c_2(\beta\Delta_L(\beta, \rho))^{-1}$:

$$\begin{aligned} \sigma_{meso}(x, x') &= \lim_{c_1 \downarrow 0; c_2 \uparrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2}{L} \sum_{j=c_1\beta^{-1}\Delta_L^{-1}}^{c_2\beta^{-1}\Delta_L^{-1}} e^{-j\beta\Delta_L(\beta, \rho)} \frac{1}{j\lambda_\beta^2} \\ &= 2(\rho - \rho_c(\beta)) = \sigma_{qbec}(x, x'), \end{aligned}$$

d'après l'équation (4.5).

En définitive, en limite thermodynamique, nous obtenons une décomposition de la fonction de corrélation en trois parties :

$$\begin{aligned} \sigma(x, x') &= \sigma_{macro}(x, x') + \sigma_{meso}(x, x') + \sigma_{therm}(x, x') \\ &= 8\rho_{macro} + 2\rho_{meso} + \sum_{j=1}^{\infty} \rho(j) e^{-4\pi\|x-x'\|^2/j\lambda_\beta^2} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Comme nous venons de montrer que la fonction de corrélation pour le condensat usuel est celle pour les cycles macroscopiques, pour le quasi-condensat est celle pour les cycles mésoscopiques et pour le gaz thermique celle pour les cycles courts, on obtient les mêmes résultats trouvés dans la section 2.6 du chapitre 2 concernant les lois d'échelle pour le rayon de corrélation des différentes parties de la fonction de corrélation :

- pour les cycles macroscopiques, le rayon de corrélation est macroscopique dans les trois directions

- pour les cycles mésoscopiques, le rayon de corrélation est macroscopique dans la direction x_3 et mésoscopique dans le plan (x_1, x_2) d'anisotropie maximale, on note $r_c(L)$ le rayon dans le plan (k_1, k_2) :

$$\begin{aligned} r_c(L) &= \frac{\lambda_\beta}{\sqrt{\Delta_L(\beta, \rho)}} = \lambda_\beta e^{\frac{\lambda_\beta^2}{2}(\rho - \rho_c(\beta))L}, \quad \rho < \rho_m(\beta) \\ &= \lambda_\beta e^{\alpha L}, \quad \rho > \rho_m(\beta) \end{aligned}$$

4.5 Analogie entre les polymères et les cycles

Pour avoir une représentation spatiale des cycles pour coller avec une image de polymères, introduisons ici la représentation de Feynman-Kac de la fonction de partition.

Ainsi on trouve un rayon de corrélation correspondant aux cycles longs mésoscopiques qui nous donne une image de sa représentation spatiale : on peut voir ces polymères mésoscopiques comme des boucles (fermées) composée par un nombre $n(L)$ de monomères bosoniques qui s'étendent sur un rayon de taille $r_c(L)$ définit comme le rayon de corrélation où les monomères bosoniques sont séparés d'une distance moyenne λ_β correspondant aux fluctuations thermiques, nous obtenons ainsi

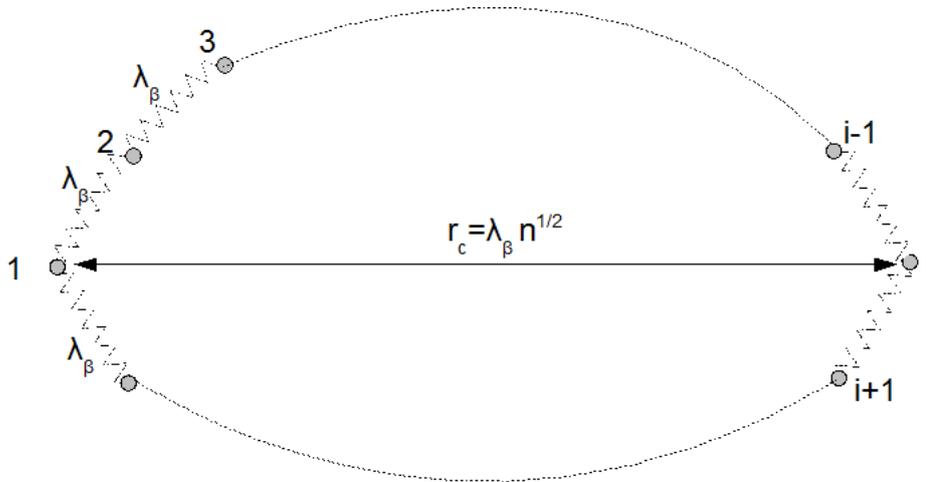


FIG. 4.2 – Représentation d’un cycle de taille n et de son rayon de corrélation

la relation d’échelle entre la taille du polymère bosonique et le nombre de monomères dans celui-ci, voir figure 4.2 :

$$r_c(L) = \lambda_\beta n(L)^{1/2}. \quad (4.10)$$

Cette représentation des cycles de bosons est analogue à la description des polymères classiques, et plus spécifiquement des chaînes idéales linéaires d’après l’approche d’échelle de P-G de Gennes [38] des années 1970, où le polymère est représenté comme une chaîne de monomères (non fermée) où l’étendue spatiale R définie par le rayon de corrélation de la chaîne est reliée au nombre de monomère dans cette chaîne N (séparée par une distance moyenne a) par la relation d’échelle, voir figure 4.3 :

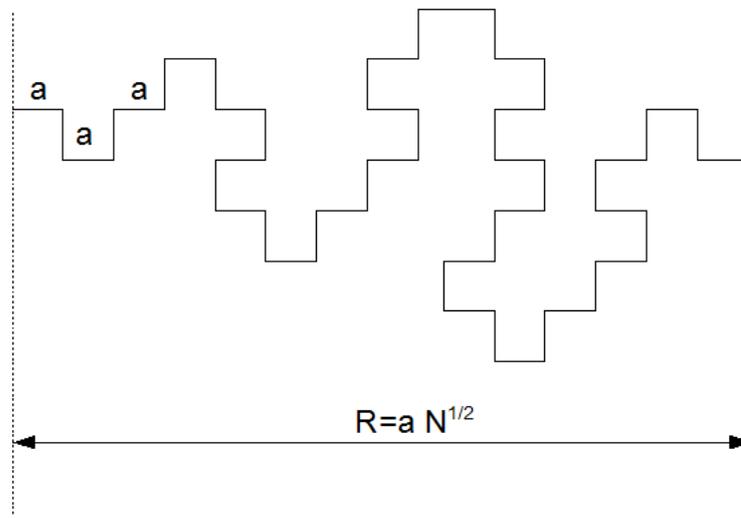
$$R = aN^{1/2}, \quad (4.11)$$

ce qui est typiquement une relation équivalente à la relation (4.10) pour notre problème dans le gaz de Bose.

4.5.1 Description des chaînes idéales et conformation statique

Le formalisme de de Gennes de chaînes idéales pour décrire les polymères est tout à fait similaire au formalisme pour décrire le gaz parfait de Bose vue par les cycles dans la représentation de Feynman-Kac. Les objets physiques concernant les deux théories sont bien entendu différents, mais les similitudes mathématiques permettent de voir des analogies entre les différents phénomènes décrits par les deux théories différentes en soit.

Rappelons tout d’abord l’idée de P.-G de Gennes que l’on peut trouver dans son livre [38], considéré comme une référence dans la communauté des physiciens des polymères.


 FIG. 4.3 – Représentation d'un polymère de taille N et de son rayon de corrélation

On considère une chaîne dans un réseau de Flory-Huggins de paramètre a . Cette chaîne est alors décrite par des "pas" de N marches reliant les points r_1, \dots, r_N du réseau. Si un potentiel $U(r)$ agit sur chaque monomère, la distribution statistique est alors modifiée par la pondération suivante :

$$\exp(-\beta(U(r_1) + U(r_2) + \dots + U(r_N)))$$

Prenons la somme sur tous les points des chemins avec $r_1 = r'$ et $r_N = r$ fixés :

$$z^N G_N(r', r) \quad (4.12)$$

où z est le nombre de voisins d'un site dans le réseau (e.g. pour un système 3D, $z = 6$). La fonction $G_N(r', r)$ est réelle, positive et symétrique et égale à la fonction delta de Dirac pour $N = 0$. Si on rajoute un pas à la chaîne on trouve :

$$G_{N+1}(r', r) = \frac{1}{z} \sum_{r''} G_N(r', r'') e^{-\beta U(r)} \quad (4.13)$$

où $\sum_{r''}$ est la somme sur tous les sites voisins de r , notons que $\sum_{r''} 1 = z$ par définition. Cette équation (4.12) signifie que tous les chemins de $N + 1$ marches, atteignant r , doivent atteindre l'un des voisins du chemin de N marches précédent. Le facteur $1/z$ provient de la normalisation choisie en (4.13).

Ce qui motive la théorie sont les effets à grandes échelles spatiales par rapport à a . Ainsi on assume que G varie peu pour un incrément de $\Delta N = 1$ et de $\Delta r = a$. On assume aussi que βU est très petit (comme notre piège harmonique dans le chapitre 3). Avec ces hypothèses simplificatrices, nous obtenons :

$$\begin{aligned} G_{N+1}(r', r) &\simeq \frac{1}{z} (1 - \beta U(r)) \sum_{r''} (G_N(r', r) + (r - r'') \frac{\partial G_N(r', r)}{\partial r} \\ &+ \sum_{\nu, \nu'=1}^3 \frac{1}{2} (r - r'')_{\nu} (r - r'')_{\nu'} \frac{\partial^2 G_N(r', r)}{\partial r_{\nu} \partial r_{\nu'}} + \dots) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Comme nous sommes sur tous les r'' , le terme linéaire en $r - r''$ s'annule pour un réseau à symétrie centrale, et nous obtenons :

$$G_{N+1}(r', r) - G_N(r', r) \simeq \frac{\partial G_N(r, r')}{\partial N} = -\beta U(r)G_N(r, r') + \frac{a^2}{6}\Delta G_N(r', r) \quad (4.15)$$

car $z^{-1} \sum_{r''} (r - r'')_\nu (r - r'')_{\nu'} = \delta_{\nu\nu'} a^2/3$, Δ représente l'opérateur laplacien par rapport à la variable r . Nous pouvons donc écrire l'équation aux dérivées partielles pour $G_N(r, r')$:

$$-\frac{\partial G_N(r, r')}{\partial N} = -\frac{a^2}{6}\Delta G_N(r', r) + \beta U(r)G_N(r, r') . \quad (4.16)$$

Cette équation est similaire à une équation de diffusion ou à une équation d'onde de type Schrödinger avec un temps imaginaire. Pour la résoudre c'est d'ailleurs la même méthode utilisée lorsque l'on considère des conditions de bord (par exemple : si au lieu d'avoir un potentiel $U(r)$ on a une boîte cubique et la condition de type Dirichlet), ainsi on cherche l'équation aux valeurs propres pour l'opérateur intervenant dans (4.16) :

$$\mathfrak{H} = -\frac{a^2}{6}\Delta + \beta U(r) \quad (4.17)$$

en introduisant l'ensemble des fonctions propres $u_1(r), u_2(r), \dots, u_k(r), \dots$ solutions de

$$\mathfrak{H}u_k = \epsilon_k u_k \quad (4.18)$$

avec comme valeur minimale $\epsilon_0 \equiv \inf_k \epsilon_k$ ce que nous appelons le niveau d'énergie fondamental associé à l'état fondamental u_0 . Les fonctions propres sont orthonormées et vérifient la relation de fermeture :

$$\int dr u_k^*(r) u_{k'}(r) = \delta_{kk'} \quad (4.19)$$

$$\sum_k u_k^*(r) u_k(r') = \delta(r - r') \quad (4.20)$$

Ainsi la forme explicite pour $G_N(r, r')$ est l'expansion sur les fonctions propres u_k :

$$G_N(r, r') = a^3 \sum_k u_k^*(r') u_k(r) e^{-N\epsilon_k} \quad (4.21)$$

On peut aisément vérifier que la forme (4.21) est bien solution de l'équation (4.16). Cette description d'une chaîne idéale basée sur les marches aléatoires permet d'étudier la *conformation statique* des polymères à partir de l'approche d'échelle.

Regardons maintenant l'étude de la conformation statique d'une chaîne idéale linéaire (pas d'interaction entre les monomères et sans branchements), sans potentiel extérieur $U = 0$, de taille $N \gg 1$ plongée dans l'espace \mathbb{R}^3 . On résoud l'équation

(4.16) sans conditions aux bords, ce qui nous donne *une équation de diffusion standard* avec comme fonctions propres les ondes planes :

$$u_k(r) = e^{ikr}, \quad k \in \mathbb{R}^3 \quad (4.22)$$

on a les niveaux d'énergie suivants : $\epsilon_k = \frac{a^2}{6}k^2$. On trouve une fonction de corrélation pour la chaîne :

$$\begin{aligned} G_N(r, r') &= a^3 \int_{\mathbb{R}^3} d^3k u_k^*(r') u_k(r) e^{-N\epsilon_k} \\ &= 2\pi \int_0^\infty d\|k\| \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \|k\|^2 e^{i\|k\|\|r-r'\| \cos(\theta)} e^{-N\frac{a^2}{6}\|k\|^2} \\ &= \text{cste} N^{-3/2} e^{-\frac{\|r-r'\|^2}{2Na^2}} \end{aligned} \quad (4.23)$$

ce qui nous donne typiquement une gaussienne de largeur :

$$\langle \|r - r'\|^2 \rangle \equiv R_0^2 = Na^2 \quad (4.24)$$

Nous allons maintenant étudier la conformation statique d'une chaîne idéale de longueur N dans une boîte cubique $\Lambda = L^3$ où notre système de coordonnées est r_1, r_2, r_3 . On résoud ainsi l'équation (4.16) avec les conditions de Dirichlet : $u_k(0) = u_k(L) = 0$. On obtient donc :

$$u_k(r) = \prod_{\nu=1}^3 \frac{2}{L} \sin(k_\nu r_\nu), \quad k_\nu = \frac{\pi n_\nu}{L}, \quad n_\nu \in \mathbb{N}^*, \quad (4.25)$$

avec les valeurs propres suivantes : $\epsilon_k = \frac{a^2}{6}k^2$. On trouve une fonction de corrélation pour la chaîne :

$$\begin{aligned} G_N(r, r') &= a^3 \sum_k u_k^*(r') u_k(r) e^{-N\epsilon_k} \\ &= \prod_{\nu=1}^3 \frac{2}{L_\nu} \sum_{n_\nu=1}^\infty \sin(k_\nu r_\nu) \sin(k_\nu r'_\nu) e^{-N\frac{a^2}{6}\frac{n_\nu^2 \pi^2}{L^2}}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

On suppose que la chaîne de longueur $N \gg 1$ (intérêt pour les polymères), alors d'après l'équation (4.26) on considère que le mode fondamental est le mode dominant pour la chaîne [38], on a donc :

$$G_N(r, r') \simeq a^3 \prod_{\nu=1}^3 \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi}{L}(r_\nu + r'_\nu)\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}(r_\nu - r'_\nu)\right) e^{-N\frac{a^2}{6}\frac{\pi^2}{L^2}}. \quad (4.27)$$

On obtient d'après l'équation (4.27) deux conditions d'échelle pour lesquelles la fonction de corrélation est positive mais décroissante, à savoir si $\|r - r'\| = O(L)$ et $Na^2 = O(L^2)$, et donc $Na^2 = O(\|r - r'\|^2)$ ce qui donne la loi d'échelle usuelle pour une chaîne idéale et ce qui est analogue au cas des cycles de bosons libres dans l'état fondamental, voir équations (4.10), (4.11).

4.5.2 conformation statique ("figée") des cycles de bosons

On peut remarquer une profonde similitude de la description précédente avec la formulation pour le gaz parfait du noyau de l'opérateur de Gibbs $K(j\beta; r, r') = e^{-j\beta H}(r, r')$ qui intervient dans le calcul des grandeurs thermodynamique, avec H l'hamiltonnien pour une particule et j la taille des cycles de bosons. En effet si on considère un gaz libre de bosons sous un potentiel extérieur $V(r)$, $r \in \mathbb{R}^3$:

$$H = -\frac{\hbar}{2m}\Delta_x + V(r) \quad (4.28)$$

alors le noyau de Gibbs $K(j\beta; r, r')$ est solution de l'équation :

$$-\frac{\partial K(j\beta; r, r')}{\partial j\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta K(j\beta; r, r') + U(r)K(j\beta; r, r') \quad (4.29)$$

qui est similaire à l'équation (4.16) avec :

$$\begin{cases} a \leftrightarrow \lambda_\beta \\ N \leftrightarrow j \end{cases} \quad (4.30)$$

Via l'approche de la mécanique statistique par la formulation de Feynman-Kac représentant le noyau de Gibbs comme une intégrale de Wiener (voir les références [43], [12], [68]), nous avons pour la partie diagonale du noyau d'un cycle de taille j , l'expression suivante :

$$K_\Lambda(j\beta; r, r) = \int_\Lambda dr_2 \dots \int_\Lambda dr_{j-1} K_\Lambda(\beta; r, r_2) K_\Lambda(\beta; r_2, r_3) \dots K_\Lambda(\beta; r_{j-1}, r) \quad (4.31)$$

où les noyau $K_\Lambda(\beta; r_i, r_{i+1})$, $i = 1, j$, $r_1 = r_j = r$ sont donnée par :

$$K_\Lambda(\beta; r_i, r_{i+1}) = \sum_k \psi_k(r_i) \psi_k(r_{i+1}) e^{-\beta \epsilon_\Lambda(k)} \quad (4.32)$$

ce qui en limite thermodynamique donne des gaussiennes normalisées à l'unité :

$$K(\beta; r_i, r_{i+1}) = \frac{1}{\lambda_\beta^3} e^{-\frac{4\pi \|r_i - r_{i+1}\|^2}{\lambda_\beta^2}} \quad (4.33)$$

on a donc :

$$K(\beta; r, r) = \frac{1}{\lambda_\beta^3} . \quad (4.34)$$

Pour $\beta \mapsto j\beta$ en volume fini on a :

$$K_\Lambda(j\beta; r, r') = \sum_k \psi_k(r) \psi_k(r') e^{-j\beta \epsilon_\Lambda(k)} , \quad (4.35)$$

La partie non-diagonale en limite thermodynamique est :

$$K(j\beta; r, r') = \frac{1}{j^{3/2}\lambda_\beta^3} e^{-\frac{4\pi\|r-r'\|^2}{j\lambda_\beta^2}}, \quad (4.36)$$

on a donc :

$$K(j\beta; r, r) = \frac{1}{j^{3/2}\lambda_\beta^3}. \quad (4.37)$$

Pour le cas cubique $\Lambda = L^3$, on a des cycles de tailles macroscopique $j = O(N)$ ainsi comme pour les chaines idéale on ne garde que le mode fondamental et on trouve la relation d'échelle $n\lambda_\beta = r_c^2$, où $n = O(N)$ est l'échelle de taille des cycles macroscopique et r_c est l'échelle de corrélation maximale, ainsi on retrouve la relation (4.10) similaire à la relation (4.11).

Pour le cas exponentiellement anisotrope sur deux dimensions $\Lambda = Le^{\alpha L} \times Le^{\alpha L} \times L$, pour $\rho < \rho_m$ on ne garde que les énergie à l'échelle du potentiel chimique $\mu_L = \inf_k \epsilon_\Lambda(k) - \beta^{-1} e^{\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c)L}$ et on obtient donc que $n = e^{-\lambda_\beta^2(\rho - \rho_c)L}$ ainsi d'après l'équation (4.35) $n\lambda_\beta^2 = r_c^2$. De même pour $\rho > \rho_m$, pour les cycles mésoscopique de l'ordre de $e^{\alpha L}$, on trouve que $n\lambda_\beta^2 = r_c$.

La relation (4.10) qui donne la relation d'échelle pour la conformation statique des cycles de bosons est en fait assez naturelle car la conformation est décrite par une équation de diffusion (équation 4.29 avec $U(r) = 0$) et donc le "rayon de diffusion" r des particules (analogue du monomère) est calculé d'après l'équation de Langevin, on a $r \equiv \sqrt{\langle r^2 \rangle} = \sqrt{6Dt}$, où t est le temps de diffusion, D est le coefficient de diffusion, avec par analogie :

$$\begin{cases} t \leftrightarrow n\beta \\ D \leftrightarrow \frac{\pi\hbar^2}{3m} \end{cases}$$

4.5.3 Analogie gaz de cycles/solution de polymères

La différence ici c'est que pour les cycles de bosons, on regarde le comportement statistique d'un gaz de bosons ou de cycles de bosons, c'est à dire un ensemble très grand de particules en contact avec un thermostat faisant office de réservoir de particules. On a donc deux paramètres thermodynamique : la température et la densité (ou le potentiel chimique). Ainsi la loi d'échelle qui donne l'écart quadratique moyen $r_c(L)$ entre les particules des cycles longs dans le gaz est déterminée par deux choses :

- le processus Brownien décrit par la formulation de Feynman-Kac du noyau $K(j\beta, r, r')$ du semi-groupe de Gibbs $e^{-\beta H}$, ce qui nous donne la loi de décroissance gaussienne

- les paramètres thermodynamiques qui nous donne le comportement statistique des cycles de bosons, c'est à dire la distribution des cycles en fonction de leur longueur.

L'analogie est donc limitée par cette nuance. Cependant dans les références [35], est écrit une fonction de partition analogue au gaz de cycles de bosons qui permet de décrire le comportement statistique d'une solution de polymères fermés (des polymère en "boucles") et un point critique séparant deux régimes : polymères microscopiques/polymères macroscopiques, analogue à la température/densité critique dans le gaz de bosons séparant deux régimes : cycles courts/cycles macroscopiques de bosons.

Ainsi on peut imaginer qu'il existe des solutions de polymères dont la fonction de partition est similaire à celle du gaz parfait de bosons dans des boîtes exponentiellement anisotrope pour lesquelles un second point critique séparant deux régimes : polymères mésoscopiques/polymère macroscopiques analogue au second point critique dans le gaz parfait de bosons séparant deux régimes : cycles mésoscopiques/cycles macroscopiques.

Un exemple traité dans [35] est la transition d'émulsion pour une solution composé d'eau, d'huile et d'un tensioactif (e.g. le savon constitué de molécules amphiphiles) qui sépare un régime de microémulsions/macroémulsions (gouttes d'huile macroscopiques). Ils considèrent que la solution contient une certaine concentration d'huile ϕ proportionnelle au volume des gouttes d'huile. Chaque goutte d'huile est confinée dans un piège isotrope formé par des molécules amphiphiles, on appelle ce système goutte d'huile plus tensioactif une *émulsion*. C'est précisément le principe de fonctionnement de la lessive : corps gras piégé par un tensioactif. Ces émulsions usuellement sont microscopiques, i.e, des *microémulsions*, d'une taille de l'ordre du nanomètre. Nous avons une concentration de molécule amphiphiles ξ dans la solution aqueuse :

$$\xi = c_0\rho_0 + c_1 \int_1^\infty ds s^{2/3} \rho(s) , \quad (4.38)$$

où c_0, c_1 sont des facteurs géométriques appropriés, ρ_0 est le nombre de micelles (molécules amphiphiles en forme de sphère sans molécules hydrophobes à l'intérieur) dans la solution et $\rho(s)$ est le nombre de microémulsions avec s molécules hydrophobes constituant l'huile, le terme $s^{3/2}$ est un terme de surface de la goutte. Ce terme est une contrainte à ajuster avec un paramètre λ_2 (multiplicateur de Lagrange) de sorte que $\rho(s)$ et donc ϕ ainsi que ξ dépendent de λ_2 et donc qu'il y ait une relation entre ξ et ϕ , ce qui semble intuitif puisque la quantité de tensioactif (de molécules amphiphiles) détermine la quantité de microémulsions. Ils obtiennent ainsi :

$$\phi = \int_1^\infty ds s e^{s^{1/3} - \lambda_2 s^{2/3} - \lambda s} \quad (4.39)$$

$$\xi = e^{-\lambda_2} + \int_1^\infty ds s^{3/2} e^{s^{1/3} - \lambda_2 s^{2/3} - \lambda s} \quad (4.40)$$

où $\rho(s) = e^{s^{1/3} - \lambda_2 s^{2/3} - \lambda s}$, $C_0\rho_0 = e^{-\lambda_2}$, $\lambda > 0$ joue le rôle d'un potentiel chimique ($e^{-\lambda s}$ est similaire au terme $e^{j\beta\mu}$, $\mu < 0$) le terme $s^{1/3}$ provient d'un élément de courbure dite spontanée qui dépend de la température.

Ces équations s'obtiennent à partir d'un principe de variation sur la densité d'énergie libre du système par unité de $k_B T$:

$$\beta \frac{F}{V} = \int_1^\infty ds \rho(s) (\ln \rho(s) - 1 + f(s) + as)$$

avec les contraintes $\lambda_2 s^{2/3}$ et $-\mu\phi$. On trouve donc

$$\rho(s) = e^{-f(s) - \lambda_2 s^{3/2} - \lambda s}$$

avec $\lambda = a - \mu$. Sachant que la densité d'énergie libre pour une microémulsion :

$$f(s) = a_0 - a_1 s^{1/3} + a_2 s^{2/3}$$

où a_0, a_1, a_2 sont des constantes physico-chimiques qui dépendent des courbures locales et spontanées de l'émulsion, de son énergie de surface et de ses modules d'élasticités. Et sachant que :

$$\begin{aligned} \phi &= \int_1^\infty ds s e^{s^{1/3} - \lambda_2 s^{2/3} - \lambda s} \\ \xi &= e^{-\lambda_2} + \int_1^\infty ds s^{3/2} e^{s^{1/3} - \lambda_2 s^{2/3} - \lambda s} \end{aligned}$$

on trouve les résultats de (4.39) en prenant $a = a_0 = a_2 = f_0 = 0$ et $a_1 = c_0 = c_1 = 1$.

Etant donné que le potentiel chimique $\mu < 0$ est strictement négatif, en limite thermodynamique (ce que l'on considère comme telle lorsque le volume V tend vers l'infini), on trouve deux régimes pour le densité d'énergie libre par unité $k_B T$:

$$\begin{aligned} \beta \frac{F}{V} &= -e^{-\lambda_2} - \rho - \lambda_2 \xi - \lambda \phi, \quad \phi < \phi_c \\ &= -e^{-\lambda_{2,c}} - \rho_c - \lambda_{2,c} \xi, \quad \phi > \phi_c \end{aligned}$$

avec $\rho = \int_1^\infty ds \rho(s)$, ρ_c la valeur critique de ρ et $\lambda_{2,c}$ la valeur critique de λ_2 pour $\lambda = 0$.

Ainsi pour $\mu = 0$ on sature la concentration de microémulsions :

$$\phi_c = \lim_{M \uparrow \infty} \lim_{L \uparrow \infty} \int_1^M ds s \rho(s),$$

de manière similaire à la saturation de densité des cycles courts pour le gaz de Bose. Au delà de cette valeur critique ϕ_c de concentration de molécules hydrophobes, on a donc apparition de macroémulsions :

$$\phi = \int_1^{s_1(V)} ds s \rho(s) + \int_{s_1(V)}^\infty ds s \rho(s)$$

avec un paramètre d'échelle $s_1(V)$ qui tend vers l'infini quand V tend vers l'infini. Ce phénomène de transition entre micro/macroémulsions, analogue à la transition de Bose-Einstein, a fait l'objet d'études expérimentales [39] dans les années 1990.

L'idée nouvelle dans cette section est de rapprocher cette approche à l'échelle $s_1(V)$ avec notre approche d'échelle introduite au chapitre 1 et adaptée pour l'étude de la seconde transition pour des milieux quasi-2D, étudiés dans la section 4.4 de ce chapitre pour les cycles de bosons. Notons qu'il existe des études numériques et théoriques pour l'auto-assemblage des molécules amphiphiles avec une distribution des molécules dans les agrégats analogues à la distribution de Bose-Einstein [37], et dans des milieux 2D ou quasi-2D, [36].

En effet prenons la même théorie de transition d'émulsion mais dans un milieu très anisotrope quasi-bi-dimensionnel $\Lambda = Le^{\alpha L} \times Le^{\alpha L} \times L$. Imaginons par exemple une étude expérimentale de la solution d'eau plus huile plus savon entre deux lamelles de verre séparées de petites distance suffisamment grande devant la distance intermoléculaire mais suffisamment petite devant les tailles des lamelles. En considérant que l'effet aux bord sur les lammelles de verre est répulsif (ce qui est le cas pour l'eau), on peut étudier la formation des émulsions par analogie avec notre modèle de gaz parfaits de bosons dans une boîte quasi-2D exponentielle avec les conditions de Dirichlet. Dans ce cas, je prédis que si on observe au microscope par exemple, les émulsions en faisant varier soit la concentration d'huile, on devrait mesurer, par un processus micrométrique particulier, deux densités critiques ϕ_c et ϕ_m , la première étant la densité de saturation des microémulsions et la deuxième étant la densité de saturation d'émulsions mésoscopiques dites *mésémulsions*, chacune contenant un nombre $s_1(L) = e^{\lambda_\beta^2(\phi-\phi_c)L}$ de molécule hydrophobes, c'est à dire des gouttes de tailles $L_{c_1}(L) = Le^{\frac{\lambda_\beta^2}{2}(\phi-\phi_c)L}$. Au delà de ϕ_m , on devrait observer l'apparition de macroémulsions avec une quantité saturée de mésémulsion contenant $s_2(L) = e^{\lambda_\beta^2(\phi_m-\phi_c)L}$ molécules hydrophobes et donc des gouttes de rayon $L_{c_2}(L) = Le^{\frac{\lambda_\beta^2}{2}(\phi_m-\phi_c)L}$.

4.6 Perspectives

En vertu de l'analogie cycles de bosons/polymères, on peut s'inspirer du modèle d'interaction de type champ moyen pour une configuration statique d'un polymère [38] afin d'inventer un modèle analogue : interaction type champ moyen dans un cycle de taille n du type $\mu(n) = \mu - g(V)n^2$ où $\mu(n)$ est le potentiel chimique effectif pour un cycle de taille n , μ est le potentiel chimique grand-canonique et $g(V)$ est l'amplitude de l'interaction dépendant du volume de la boîte, par exemple $g(V) = g_0/V^\delta, \delta > 0$. On trouve alors une expression explicite de la densité de particules dans un cycle de taille n :

$$\rho_\Lambda(n) = \frac{1}{V} e^{n\beta\mu} e^{-\beta g(V)n^2} \sum_k e^{-n\beta\epsilon_k},$$

ainsi selon la loi d'échelle pour $g(V)$, on aura statistiquement une modification des tailles de cycles longs qui apparaissent ainsi que de la relation d'échelle entre le rayon de corrélation et la taille du cycles :

$$r_c = \lambda_\beta n^\nu,$$

où ν dépend de la forme de $g(V)$ pour le cas du champ moyen répulsif et $\nu = 1/2$ pour le gaz parfait.

Ce modèle est similaire à l'étude de la conformation statique des chaînes réelles de polymères dans les bons solvants (solvants dilués) [38] avec une interaction de type champ moyen pour un polymère contenant $N \gg 1$ monomères interagissants les uns avec les autres de manière répulsive. On a donc une modification approximative pour l'énergie libre de ce polymère :

$$\beta \frac{F}{V} \cong \frac{R^2}{Na^2} + v \frac{N^2}{R^3}.$$

avec $\frac{R^2}{Na^2}$ le terme d'énergie élastique pour une chaîne idéale et $v \frac{N^2}{R^3}$ le terme d'énergie potentielle répulsive pour la chaîne avec le paramètre de volume exclu $v = (1 - 2\chi)a^3$ (ou l'équivalent de la longueur de diffusion pour $v^{1/3}$) et le paramètre d'interaction $\chi < 1/2$ pour un bon solvant. R est le rayon de corrélation de la chaîne réelle. Après une simple étude de minimisation de l'énergie libre, on trouve alors une relation d'échelle reliant le rayon de corrélation au nombre de monomères :

$$R = aN^\nu,$$

où $\nu = 3/5$ pour le cas du champ moyen répulsif et $\nu = 1/2$ pour les chaînes idéales.

Chapitre 5

Conclusion

5.1 Résultats

Je rappelle succinctement les résultats que nous avons obtenus dans la thèse.

Dans le chapitre 1 nous avons présenté une méthode d'échelle permettant de relier la classification de la condensation de Bose-Einstein généralisée [28] à une hiérarchie de taille de cycles longs et de corrélations à longue portée [14]. Nous avons appliqué cette classification à l'exemple d'un gaz parfait de Bose dans des boîtes de Casimir qui présentent les trois types de condensats (I,II,III) selon l'anisotropie. Il s'avère que pour le condensat de type I il existe des cycles macroscopiques et des corrélations à longue portée macroscopiques dans les trois directions spatiales. Il en est de même dans le cas du condensat de type II, avec comme différence une décroissance de la fonction de corrélation à l'échelle des bords de la boîte sur l'axe d'anisotropie maximale. Par contre pour le condensat de type III, il existe des cycles mésoscopiques et des corrélations mésoscopiques dans la direction d'anisotropie maximale caractérisées par une longueur de cohérence exponentiellement décroissante.

Dans le chapitre 2, nous avons étudié en détails la seconde transition pour un gaz parfait de Bose dans des boîtes exponentiellement quasi-bi-bimensionnelles [27] en s'appuyant sur les idées du chapitre 1, [30]. Rappelons qu'il existe une seconde densité critique $\rho_m > \rho_c$, qui distingue deux régimes [30] :

- pour $\rho_c < \rho < \rho_m$ le quasi-condensat (condensat généralisé de type III) pour lequel aucun mode n'est macroscopiquement occupé mais une bande énergétique proche du niveau fondamental contient un nombre macroscopique de particules, chaque mode dans cette bande contenant un nombre mésoscopique de particules.

- pour $\rho > \rho_m$ la coexistence entre un condensat usuel sur le mode fondamental et un quasi-condensat saturé.

Nous avons apporté une interprétation différente de celle-ci avec les idées de localisation énergétique et longueur de cohérence et qu'avec les calculs explicites de la seconde température critique, des fractions condensées, ce qui donne des prédictions physiques dans un régime d'interactions nulles ou quasi nulles. De plus nous avons traité l'équivalence de ce système avec le gaz parfait de Bose dans des pièges harmoniques exponentiellement quasi-bi-dimensionnels pour une description locale

au centre du piège qui été discuté dans la célèbre revue [55] pour le cas isotrope mais ce qui n’existait pas pour le cas anisotrope. Notons que nous avons discuté la pertinence physique de ce modèle non commun d’anisotropie.

Dans le chapitre 3, nous avons adapté l’étude du chapitre 2 pour un gaz parfait de Bose dans des pièges harmoniques exponentiellement quasi-uni-bimensionnels [30], ce qui n’existait pas auparavant.

Dans le chapitre 4, Nous avons regardé la seconde transition du point de vue des cycles de bosons, qui se manifeste par une modification de l’échelle de longueur des cycles avec :

- pour $\rho_c < \rho < \rho_m$ une échelle de croissance exponentielle de cycles mésoscopiques, mais plus petite que l’échelle de croissance des longueurs du plan de la boîte quasi-2D.

- pour $\rho > \rho_m$ la coexistence entre des cycles macroscopique et des cycles mésoscopiques saturés (leur taille et leur nombre).

Nous avons, grâce à notre approche d’échelle, traité d’une nouvelle manière l’analogie polymères/cycles de bosons en regardant les similitudes formelles entre notre approche d’échelle pour les cycles et la description de la conformation statique à la P. -G de Gennes [38] et de la statistique des polymères en solutions [35] notamment pour une solution aqueuse contenant des molécules amphiphiles et hydrophobes.

5.2 Perspectives

5.2.1 Méthode d’échelle

L’étude présentée dans cette thèse possède une limite importante car elle ne s’applique pas au gaz avec interactions entre les particules ; le problème des interaction reste généralement considérable encore aujourd’hui. Ainsi dans un premier temps, l’approche théorique développée dans le premier chapitre que j’ai appelée *approche d’échelle*, a été formulée d’abord pour le modèle du gaz parfait, pour de comprendre la méthode. Et malgré tout, il me semble que les problèmes mêlant anisotropie et interaction, soulevés à la fois par l’expérience et par la théorie soulèvent, sont très compliquées. Il suffit de constater la difficulté imposée par le théorème de Bogoliubov-Hoening [31], [32] pour savoir si le condensat de Bose-Einstein existe ! La notion de *condensation de Bose-Einstein généralisée* [28] qui date d’une trentaine d’années n’est pas, à mon sens, suffisamment connue et utilisée pour traiter ces problèmes profonds de nature et d’existence des condensats. La preuve en est, pour le gaz parfait de Bose la notion d’existence de condensat de type III que l’on a appelé quasi-condensat, et la notion de seconde transition qui permet de changer le régime de condensat sont très peu connues. On peut bien entendu se demander quelle est la pertinence physique des prédictions faites dans ces modèles parfait et très anisotropes, mais elles peuvent en tout cas se voir comme des références de base pour étudier le modèle de gaz en interaction, au moins en faible interaction.

Concernant le concept de condensation généralisé, l’objectif de cette thèse a été en partie de lui donner un nouveau visage qui pourrait être plus adapté à la

caractérisation physique et théorique pour le gaz en interaction. Notamment en ce qui concerne le critère de Penrose et Onsager [9], nous en avons maintenant une hiérarchie, via le concept de longueur de cohérence, reliée, au moins pour le gaz parfait, à la classification de van den Berg-Lewis-Pulé pour la condensation généralisée. De plus nous avons obtenu de manière équivalente une hiérarchie de cycles longs qui pourrait éventuellement permettre l'étude du cas en interaction bi- ou quasi-bi-dimensionnelle via des méthodes numériques et théoriques, je pense en partie aux travaux suivants [34], [44], [45].

5.2.2 La seconde transition pour un gaz de Bose quasi-uni et quasi-bi-dimensionnel

La seconde transition prédite dans cette thèse pour le modèle du gaz parfait dans un piège harmonique d'anisotropie exponentielle quasi-uni-dimensionnel, implique des modifications quelque peu surprenante en ce qui concerne la fraction condensée pour le condensat usuel (sur le mode fondamental). En effet si un expérimentateur est capable de produire un tel système : gaz parfait ou en très faible interaction (via les résonances de Feschbach, [19] chapitre 5), disons très dilué, dans un piège très anisotrope avec un rapport entre les longueurs de confinement allant de 100 à 1000 (voir plus si cela est techniquement possible), il ne verra l'apparition du condensat sur le niveau d'énergie fondamentale qu'à partir d'une température critique qui sera déviée par rapport à la température critique T_c usuelle. Par exemple un gaz de ^{87}Rb dans un piège avec des pulsations $\omega_{\perp} = 2\pi \times 655Hz$, $\omega_z = 2\pi \times 6.55Hz$ [16] et une première température critique $T_c = 50nK$, on aura $T_m = 27.5nK$, d'où une différence relative de 45 %. Si l'expérimentateur considère qu'il observe un condensat à partir de la température de formation un pic Gaussien (interprété comme la fonction d'onde du premier niveau d'énergie), c'est à dire que la température de condensation est T_m , alors il mesurera une courbe donnant la fraction condensée bien différente de la courbe usuelle en 3D et même en 1D (voir figure 3.2 du chapitre 3) :

$$\frac{N_{BEC}}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_m}\right)^3 \left(\frac{1 + \left(\frac{\tau}{T}\right)^2}{1 + \left(\frac{\tau}{T_m}\right)^2}\right), T < T_m$$

D'un autre côté, l'expérimentateur peut savoir qu'il est trompé à cause l'existence d'un quasi-condensat avant cette seconde température critique, et dans ce cas il peut procéder à des mesures de cohérence du quasi-condensat. Alors d'après les équations (3.35) et (3.36) du chapitre 3, s'il trace le logarithme du rapport longueur de cohérence L_c divisée par la plus petite taille de confinement L_{\perp} en fonction de la température, il pourra voir le comportement de la courbe similaire à celui de la figure 3.6. Les fonctions de corrélations pour le quasi-condensat devront avoir une allure similaire à la courbe de la figure 3.5 du chapitre 3.

Il reste, bien entendu, à traiter le problème des interactions entre les particules. La question qui se pose naturellement est la suivante : quelle est l'effet des in-

teractions sur le décalage de la seconde température/densité critique ? Autrement posé : comment jauger l'effet purement géométrique sur la distribution cinétique du condensat en présence d'interaction et comment rentrent en compétition ces deux effets ?

Pour le cas homogène quasi-2D, on peut dans une première approche supposer que les interactions n'ont aucun effet sur le condensat mais modifient de manière indépendante de la géométrie, la première température critique de saturation de la partie thermique du gaz. Dans ce cas nous avons une température critique $T_c(a)$ où a est la longueur de diffusion entre deux atomes (par exemple $a \simeq 5.88nm$ pour le ^{87}Rb) déterminée par des méthodes différentes [65], [45] et d'autres. Par contre sous notre hypothèse simplificatrice, la différence entre les deux densités critiques $\rho_m(a) - \rho_c(a)$ est indépendante de a car le condensat ne subit pas d'interaction, et donc $\rho_m(a) = \rho_c(a) + \frac{2\alpha}{\lambda_\beta^2}$, ce qui modifie la seconde température critique. Mais convenons que nous n'avons pas pour le moment l'argument justifiant cette approximation. Un modèle plus réaliste serait un cas intermédiaire entre celui de Thomas-Fermi et le modèle Gaussien pour le gaz parfait.

5.2.3 Analogie polymères/cycles de bosons et seconde transition

Les perspectives concernant l'étude faite dans le chapitre 4 à propos de l'analogie polymères/cycles, nous avons déjà détaillé en fin de chapitre les éléments principaux. L'idée principale serait de s'appuyer sur cette analogie dans la description d'échelle similaire pour les deux objets afin d'établir de nouveaux modèles pour traiter le gaz de Bose en interaction. En effet, on pourrait voir le gaz de cycles de bosons comme une solution de polymères en interaction de type champ moyen et trouver les relations d'échelles entre les longueurs de corrélations des cycles et le nombre de bosons les constituant. Tout cela reste à construire, mais nous avons déjà une idée de la procédure de recherche.

En ce qui concerne la seconde transition, l'analogie pourrait avoir une application inverse, comme nous l'avons vu pour une solution aqueuse de molécules amphiphiles et hydrophobes [35], [37], pour lesquelles des expériences se sont déjà réalisées [39] et pour lesquelles les modèles basses dimensions semblent intéresser les chercheurs du domaine [36].

Pour pousser les perspectives à ce propos, depuis quelques années, des expériences se font pour expliquer la transition vitreuse pour du polystyrène par exemple dans milieux très anisotropes quasi-2D [69]. Ils observent un décalage de la température de transition vitreuse T_g vers le bas, et observent, si la taille du polymère est plus petite que l'écart entre les deux plaques confinantes, deux transitions vitreuses. Les explications théoriques de ce problème sont encore insatisfaisantes. Nous pouvons envisager de futures investigations dans cette direction.

Bibliographie

- [1] A. Einstein, Quantentheorie des einatomigen idealen Gases, Königliche Preußische Akademie der Wissenschaften. Sitzungsberichte pp. 261–267 (1924); A. Einstein, Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Zweite Ab- handlung, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften (Berlin). Physikalisch-mathematische Klasse pp. 3–14 (1925).
- [2] A. Einstein, Françoise Balibar, Oeuvre choisies, Tomes 1, Quanta, mécanique statique et physique quantique, ed. Seuil (1989)
- [3] E. Pérez, T. Sauer, Einstein’s quantum theory of the monatomic ideal gas : non-statistical arguments for a new statistics, Archive for History of Exact Sciences **64**, No. 5, 561-612 (2010).
- [4] F. London, On the Bose-Einstein condensation, Phys. Rev. **54**, 947-954 (1938); F. London, The λ -Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy, Nature **141**, 643 (1938)
- [5] V. A. Zagrebnov, and J. B. Bru, The Bogoliubov model of weakly imperfect Bose gas, Phys. Rep. **350**, no. 5-6, 291–434, (2001)
- [6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, Science **269** ,no. 5221, pp. 196-201 (1995)
- [7] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn and W. Ketterle , Bose-Einstein Condensation in Gas of Sodium Atoms, Phys. Rev. Lett. **75**, no. 22, 3969(5) (1995)
- [8] R. P. Feynman, Atomic Theory of the λ -Transition in Helium, Phys. Rev. **91**, 1291 (1953).
- [9] O. Penrose, L. Onsager Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
- [10] C. N. Yang, Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and of Superconductors, Rev. Mod. Phys. **34**,(1962)
- [11] K. Huang, Statistical Mechanics, 2nd ed. John Wiley et Sons, (1987).
- [12] D. Ueltschi, Feynman cycles in the Bose gas, J. Math. Phys. **47**, 123303 (2006); Relation between Feynman Cycles and Off-Diagonal Long-Range Order, Phys. Rev. Lett. **97**, 170601, (2006).

- [13] A. Sütö, Percolation transition in the Bose gas, *J. Phys. A : Math. Gen.* **26**, 4689 (1993); A. Sütö, Percolation transition in the Bose gas : II, *J.Phys.A :Math.Gen* **35**, 6995-7002 (2002).
- [14] M. Beau, A scaling approach to the existence of long cycles in Casimir boxes, *J.Phys.A* **42**, 235204 (2009).
- [15] W. Ketterle, N. J. van Druten, Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions, *Phys. Rev. A.* **54**, 656 (1996); N. J. van Druten, W. Ketterle, Two-Step Condensation of the Ideal Bose Gas in Highly Anisotropic Traps, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 549 (1997); A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower Dimensions, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001)
- [16] F. Gerbier, S. Richard, J. H. Thywissen, M. Hugbart, P. Bouyer, A. Aspect Momentum distribution and correlation function of quasicondensates in elongated traps *Phys. Rev. A* **67**, 051902(R) (2003); M. Hugbart, J. A. Retter, F. Gerbier, A. Varon, S. Richard, J. H. Thywissen, D. Clement, P. Bouyer, A. Aspect Coherence length of an elongated condensate : a study by matter-wave interferometry *European Physical Journal D* **35**, 155 (2005); M. Hugbart, J. A. Retter, F. Gerbier, S. Richard, J. H. Thywissen, A. Varon, P. Bouyer, A. Aspect Longueur de coherence d'un condensat de Bose Einstein dans un piege tres anisotrope *J. Phys. IV* **119**, 193 (2004); Mathilde Hugbart-Fouché, Etude des propriétés de cohérence d'un condensat de Bose-Einstein à l'équilibre et hors équilibre, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud - Paris XI (2005), Aspect Alain (Dir.).
- [17] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Many-Body Physics with Ultracold Gases, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008); S. Stock, Z. Hadzibabic, B. Battelier, M. Cheneau, and J. Dalibard, Observation of Phase Defects in Quasi-Two-Dimensional Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 190403 (2005); Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, and J. Dalibard, Berezinskii-Kosterlitz-Thouless crossover in a trapped atomic gas, *Nature* **441**, 1118 (2006); P. Krüger, Z. Hadzibabic, J. Dalibard, Critical Point of an Interacting Two-Dimensional Atomic Bose Gas, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 040402 (2007) Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, S. P. Rath, J. Dalibard, The trapped two-dimensional Bose gas : from Bose-Einstein condensation to Berezinskii-Kosterlitz-Thouless physics, *New J. Phys.*, **10**, 045006 (2008)
- [18] E. Mueller, T. Ho, M. Ueda, G. Baym, Fragmentation of Bose-Einstein condensates, *Phys. Rev. A* **74**, 063623 (2006).
- [19] C. J. Pethnick, H. Smith, Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2002).
- [20] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, J. T. M. Walraven, Phase-Fluctuating 3D Bose-Einstein Condensates in Elongated Traps, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 50404 (2001);

-
- [21] V. L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **32**, 493 (1971); V. L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **34**, 610 (1972)
- [22] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems, *J. Phys. C*, **6**, 1181 (1973); J. M. Kosterlitz, The critical properties of the two-dimensional xy model, *J. Phys. C*, **7**, 1046 (1974);
- [23] D. S. Petrov, D. M. Gangardt, G. V. Shlyapnikov, Low-dimensional trapped gases, *J. de Physique IV* **116**, 5–44 (2004)
- [24] M. Girardeau, Relationship between impenetrable Bosons and Fermions in one-dimension, *J. Math Phys.* **6**, 516 (1960)
- [25] H. B. G. Casimir, On Bose-Einstein condensation, *Fundamental Problems in Statistical Mechanics III*, ed E.G.D.Cohen, p. 188-196, (1968)
- [26] M. van den Berg, J.T.Lewis, On generalized condensation in the free boson gas, *Physica A* **110**, 550-564 (1982).
- [27] M. van den Berg, On Condensation in the Free-Boson Gas and the Spectrum of the Laplacian, *J. Stat. Phys.* **31**, 623-637, (1983).
- [28] M. van den Berg, J. T. Lewis and J. V. Pulè A general theory of Bose-Einstein condensation, *Helv.Phys.Acta* **59**, 1271-1288 (1986).
- [29] M. van den Berg, J. T. Lewis and M. Lunn On the general theory of Bose-Einstein condensation and the state of the free boson gas, *Helv.Phys.Acta* **59**, 1289-1310 (1986).
- [30] M. Beau, V. A. Zagrebnov, Quasi-one- and quasi-two-dimensional perfect Bose gas : the second critical density and generalised condensation, *Condensed Matter Physics* **13**, No. 2, p. 23003 (2010); M. Beau, V. Zagrebnov, The second critical point for the perfect Bose gas in quasi-one-dimensional traps, *ArXiv* :1009.1511.
- [31] N. N. Bogoliubov, *J. Phys. (Moscow)* **11**, 23 (1947); réimprimé dans D.Pines, *The Many-Body Problem* (W.A. Benjamin, New York, 1961).
- [32] P. C. Hohenberg, Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions, *Phys.Rev.* **158**, 383-386 (1967).
- [33] W. J. Mullin, M. Holzmann, F. Laloë, *J. Low. Temp. Phys.* **121**, 263 (2000).
- [34] M. Holzmann, W. Krauth, Transition Temperature of the Homogeneous, Weakly Interacting Bose gas, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2687 (1999)
- [35] J. A. Cuesta, R. P. Sear, Phase transition analogous to Bose-Einstein condensation in systems of noninteracting surfactant aggregates, *Phys. Rev. E* **65**, 031406, (2002); R. P. Sear and J. A. Cuesta, What do emulsification failure and Bose-Einstein condensation have in common?, *Europhys. Lett.* **55**, 451 (2001) .
- [36] J. M. Tavares, J. J. Weis, M. Telo da Gamma, Phase transition in two-dimensional dipolar fluids at low density, *Phys. Rev. E* **73**, 041507 (2006).

- [37] V. M. Varela, V. Fuentes, M. García, O. Cabeza, J. R. Rodríguez, Bose-Einstein-like statistics of amphiphilic self-assembly, *Colloids and Surfaces A* **319**, 2-7 (2008).
- [38] P. -G. de Gennes, *Scaling concepts in polymer physics*, Cornell University (1979).
- [39] M. S. Leaver, U. Olsson, H. Wennerstrom, R. Strey, Emulsification failure in a ternary microemulsion, *J.Phys.II* **4**, 515 (1994); D. Vollmer, R. Strey, J. Vollmer, Oscillating phase separation in microemulsions. I. Experimental observation, *J. Chem. Phys.* **107**, 3619 (1997)
- [40] P. Nozière, D. Saint James, Particle vs. pair condensation in attractive Bose liquids, *J. Phys (Paris)* **43**, 1133 (1982); P. Nozières, in *Bose-Einstein Condensation*, edited by A.Griffin, D.W.Snoke, and S. Stringari (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1996).
- [41] M. Beau, V. A. Zagrebnov, About the analogy between polymers and Feynman cycles : the second transition, en préparation
- [42] T. C. Dorlas, Ph. A. Martin, J. V. Pulé, Long Cycles in a Perturbed Mean Field Model of a Boson Gas, *J. Stat. Phys.* **121**, 433-461 (2005).
- [43] Ph. A. Martin, Quantum mayer graph : application to Bose and Coulomb gases, *Acta Physica Polinica B* **34**, 3629 (2003).
- [44] D. M. Ceperley, Path integrals in the theory of condensed helium, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 279–355 (1995)
- [45] D. Gandolfo, J. Ruiz, D. Ueltschi, On a model of random cycles, *J. Stat. Phys.* **129**, 663-676 (2007)
- [46] L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose–Einstein Condensation* (Clarendon Press, Oxford, 2003).
- [47] M. Abramowitz, I. A. Stegun, eds (1972), *Handbook of Mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables*, New York : Dover Publications.
- [48] L. Vandevenne, A. Verbeure and V. A. Zagrebnov, Equilibrium states for the Boson gas, *J. Math. Phys.* **45**, 1606-1622, (2004).
- [49] M. van den Berg, J. T. Lewis, P. de Smedt, Condensaion in the Iperfect Boson Gas, *J. Stat. Phys.* **37**, Nos. 5/6, 697 (1984).
- [50] J. Pulé, V. A. Zagrebnov, The canonical perfect Bose gas in Casimir boxes, *J. Math. Phys.* **45**, 3565 (2004).
- [51] M. Chevallier, W. Krauth, Off-Diagonal long-Range order, cycles probability, and condensate fraction in the ideal Bose gas, *Phys. Rev. E* **76**, 051109 (2007).
- [52] D. Ruelle, *Statistical Mechanics : Rigorous Results*, World Scientific (1969)
- [53] M. Bouziane and Ph. A. Martin, *J. Math. Phys.* **17**, 1848-1851 (1976).
- [54] N. N. Bogoliubov, *Selected Works*, vol. II : *Quantum Statistical Mechanics* (Gordon and Breach, N.Y.,1991); N. N. Bogoliubov, *Collection of Scientific*

- Papers in 12 vols. : Statistical Mechanics, vol. 6, Part II (Nauka, Moscow, 2006).
- [55] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gas, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
 - [56] J. Gough and J. Pulé, The spherical model of Bose-Einstein condensation, *Helv.Phys.Acta* **66**, 17 (1993).
 - [57] A. Patrick, On phase separation in the spherical model of a ferromagnet : Quasiaverage approach, *J. Stat. Phys.* **72**, no. 3-4, 665-701 (1993).
 - [58] J. Pulé, The free Boson gas in a weak external potential, *J. Math. Phys.* **24**, 138 (1983) .
 - [59] R. Zandi et al., Thinning of superfluidity films below the critical point, *Phys. Rev. E* **76**, 030601 (2007).
 - [60] Ph. A. Martin, V. A. Zagrebnov, The Casimir effect for the Bose-gas in slabs, *Europhys. Lett.* **73**(1), 15-20 (2006).
 - [61] R. M. Ziff, G. E. Uhlenbeck, M. Kac, The Ideal Bose-Einstein gas, Revisited, *Phys.Reports* **32**, 169-248 (1977).
 - [62] T. Michoel, A. Verbeure, Nonextensive Bose-Einstein condensation model, *J. Math. Phys.* **40**, 1668-1679, (1999).
 - [63] J. -B. Bru, V. A. Zagrebnov, Exactly soluble model with two kinds of Bose-Einstein condensations, *Physica A***268**, 309-325, (1999).
 - [64] T. Jaeck, J. V. Pulé and V. A. Zagrebnov, On the Nature of Bose-Einstein Condensation in Disordered Systems, *J. Stat. Phys.* **137**, No 1, 19-55 (2009)
 - [65] M. Holzmann, J.-N. Fuchs, G. Baym, J.-P. Blaizot, F. Laloe, Bose-Einstein transition temperature in a dilute repulsive gas, *Comptes Rendus Physique* **5**, 21 (2004)
 - [66] J. Pulé, G. Boland, Long Cycles in the Infinite-Range-Hopping Bose-Hubbard Model with Hard Cores, *J. Stat. Phys.* **132**, 881-905 (2008) ; G. Boland, Long cycles in the infinite-range-hopping Bose-Hubbard model, *J. Math. Phys.* **50**, 073301 (2009).
 - [67] V. Betz, D. Ueltschi, On the Critical Temperature of Dilute Bose Gases, *Phys. Rev. A* **81**, 023611 (2010)
 - [68] J. Ginibre, Some applications of fonctionnal integration in statistical mechanics *Statistical Mechanics and Quantum Field Theory*, C. DeWitt, R.Stora, eds, Les Houches, Gordon and Breach, 1971, p. 327.
 - [69] H. Liem, J. Cabanillas-Gonzalez, P. Etchegoin, D. D. C. Bradley, Glass transition temperatures of polymer thin films monitored by Raman scattering, *J. Phys. : Condens. Matter.* **16**, 721-728 (2004)

BIBLIOGRAPHIE
