

# Etude Théorique du second point critique dans le gaz de Bose

Mathieu Beau, Université Aix-Marseille II-CPT

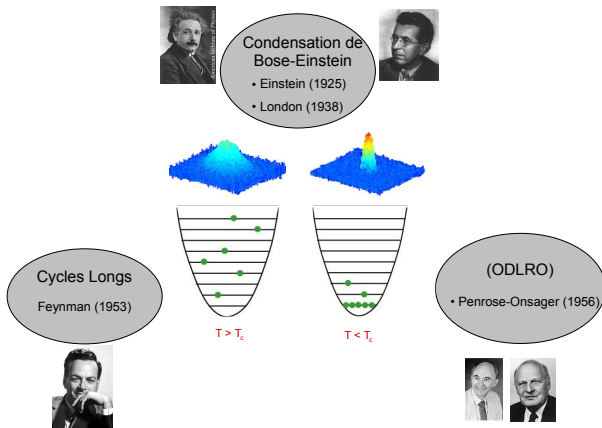
Directeur de Thèse : Valentin Zagrebnoy, Université Aix-Marseille II-CPT

1<sup>er</sup> octobre 2010

## Plan :

- 1 : Concepts de condensation de Bose-Einstein (CBE)
- 2 : Equivalence des critères, classification et approche d'échelle
- 3 : Seconde transition
- 4 : Analogie cycles/polymères
- 5 : Conclusion et perspectives

# 1. Concepts de condensation de Bose-Einstein (CBE)



Ensemble grand canonique  $(\Lambda, \beta, \mu)$ ,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $|\Lambda| = V$

Distribution de Bose-Einstein :

$$N_k(\beta, \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}, \quad \mu < \inf_k \epsilon_k = 0$$

Nombre total (moyen) de particules :  $N_\Lambda(\beta, \mu) = \sum_{k \in \Lambda^*} N_k$

Densité totale de particule :

$$\rho_\Lambda(\beta, \mu) = \frac{N_\Lambda(\beta, \mu)}{V}$$

Densité totale de particule en limite thermodynamique,  $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^3$  :

$$\rho(\beta, \mu) = \lim_{\Lambda} \rho_\Lambda(\beta, \mu)$$

## Densité critique (saturation thermique du gaz) :

$$\rho(\beta, \mu) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \mu)} - 1} < \rho_c(\beta) = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_\beta^3},$$

où  $\lambda_\beta = \hbar\sqrt{2\pi\beta/m}$ .

## Condensation de Bose-Einstein :

$$\rho_0(\beta) \equiv \lim_{\Lambda} \rho_\Lambda(k=0) = \rho - \rho_c(\beta), \quad \rho > \rho_c(\beta) \quad (1)$$

## Interprétation, London '38 :

Potentiel chimique solution de  $\rho = \rho_\Lambda(\beta, \mu) > \rho_c(\beta)$

$$\Rightarrow \mu_\Lambda = \frac{-1}{\beta(\rho - \rho_c)V} + o\left(\frac{1}{V}\right)$$

# Concepts de condensation de Bose-Einstein (CBE)

Equivalence des critères, classification et approche d'échelle

Seconde transition

Analogie cycles/polymères

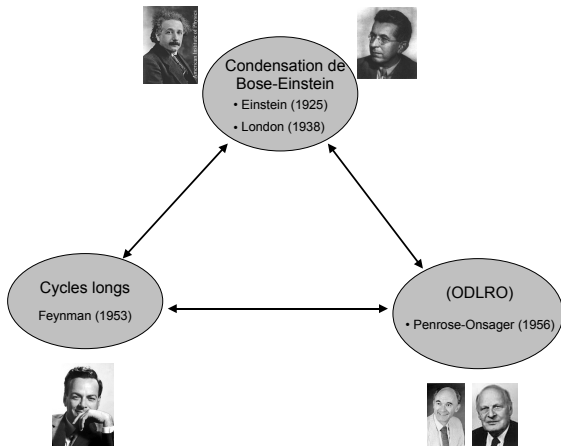
Conclusions et perspectives

1925 → 1938 : Einstein → London

1956 : Penrose-Onsager

1953 : Feynman

1981 : van den Berg-Lewis-Pulé



Fonction de corrélation :

$$\sigma(x, x') := \lim_{\Lambda} \sigma_{\Lambda}(x, x') = \lim_{\Lambda} \sum_k N_k \varphi_k(x) \varphi_k(x') \quad (2)$$

Critère de Penrose et Onsager (1956) :

$$\sigma(\beta, \rho) := \lim_{\|x-x'\| \rightarrow \infty} \sigma(x, x') > 0 \quad (3)$$

## Concepts de condensation de Bose-Einstein (CBE)

Equivalence des critères, classification et approche d'échelle

Seconde transition

Analogie cycles/polymères

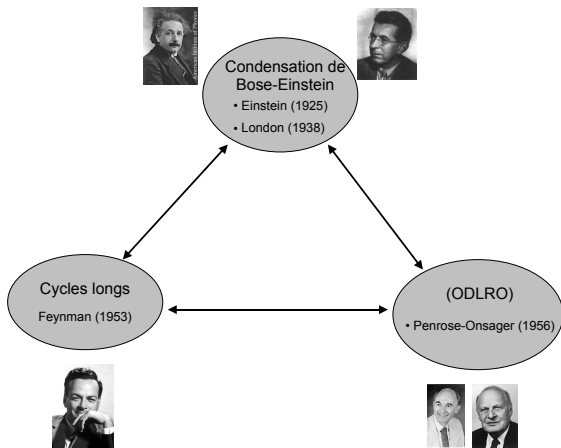
Conclusions et perspectives

1925 → 1938 : Einstein → London

1956 : Penrose-Onsager

1953 : Feynman

1981 : van den Berg-Lewis-Pulé





La densité de particules dans les cycles de taille  $j$  :

$$\rho_{\Lambda}(j) = \frac{1}{V} e^{j\beta\mu} \sum_k e^{-j\beta\epsilon_k}, \quad (4)$$

la densité totale de particules :

$$\rho_{\Lambda}(\beta, \mu) = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_{\Lambda}(j). \quad (5)$$

Critère de condensation dit d'**existence de cycles infinis** :

$$\rho_{\infty}(\beta, \rho) := \lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda} \left( \sum_{j=M}^{\infty} \rho_{\Lambda}(j) \right) > 0. \quad (6)$$

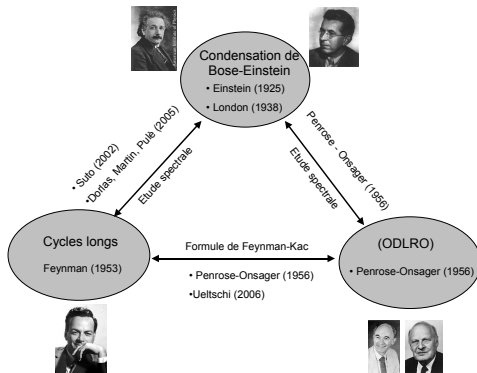
## Condensation généralisée [van den Berg-Lewis-Pulé, '81-86] :

$$\rho_0(\beta) \equiv \lim_{\eta \downarrow 0} \lim_{\Lambda} \sum_{\|k\| \leq \eta} \rho_{\Lambda}(k) = \rho - \rho_c(\beta) \quad (7)$$

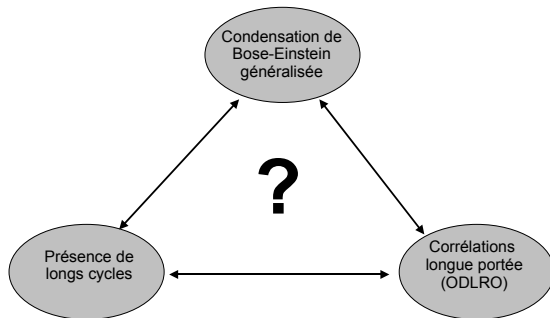
### Classification :

- Condensat conventionnel :  $N_{k=0} = O(N)$  (type I)
- Condensat Fragmenté :  $\sum_{k < k_c} N_k = N_0$ ,  $N_k = O(N)$  (type I, II)
- Quasi-condensat : bande énergétique (type III),  
 $N_k = O(N^\delta)$ ,  $\delta < 1$ ,  $N_0 = \sum_{k < k_c} N_k = O(N)$

## Ce qui est connu :



## 2. Equivalence des critères, approche d'échelle [Thèse Ch1]



**Théorème :**

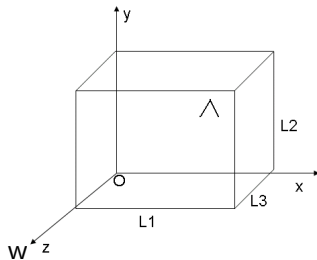
Pour un gaz parfait de Bose grand-canonique dans des boîtes parallélépipédiques quelconques  $\Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$ , nous avons :

$$\rho_0(\beta, \rho) = \sigma(\beta, \rho) = \rho_\infty(\beta, \rho) \quad (8)$$

où la densité de particules dans le condensat généralisé est :

$$\rho_0(\beta, \rho) = \begin{cases} 0, & \rho < \rho_c(\beta) \\ \rho - \rho_c(\beta), & \rho > \rho_c(\beta) \end{cases} \quad (9)$$

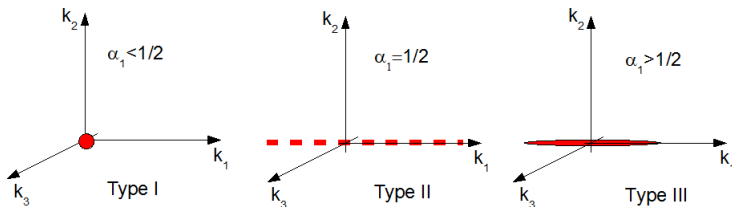
## Boîtes de Casimir :



$$L_1 = V^{\alpha_1}, L_2 = V^{\alpha_2}, L_3 = V^{\alpha_3}, \alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \alpha_3 > 0,$$

$$|\Lambda| := L_1 L_2 L_3 = V \Rightarrow \sum_{\nu} \alpha_{\nu} = 1$$

## Résultats connus :



Classification  $\Rightarrow$  Cycles et corrélations ?

**Cycles et échelle** 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, si :

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

### Classification :

- Cycles macroscopiques si  $\lambda(V) = O(V)$ .
- Cycles mésoscopiques si  $\lambda(V) = o(V)$ , e.g.  $\lambda(V) = V^{\delta}$ ,  $\delta < 1$



## Critère de Penrose et Onsager (1956) :

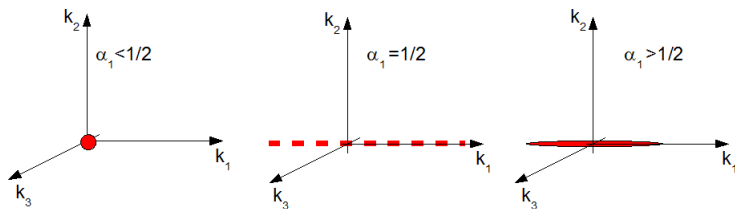
$$\lim_{\|x-x'\| \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda} \sigma_{\Lambda}(x - x') > 0 \quad (10)$$

**Changement d'échelle** :  $x - x' \mapsto X(V) : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}^3$

$$\lim_{\Lambda} \sigma_{\Lambda}(X(V)) > 0. \quad (11)$$

## Classification :

- *corrélations macroscopiques* dans la direction  $x_{\nu}$   
si  $\exists X$  tel que  $|X_{\nu}(V)| = O(L_{\nu})$ .
- *corrélations mésoscopiques* dans la direction  $x_{\nu}$  si  
non-macroscopique et si  $\exists X$  tel que  $|X_{\nu}(V)| = o(L_{\nu})$ .



g-CBE	Type I	Type II	Type III
Cycles	Macroscopiques	Macroscopiques	Mésoscopiques
Corrélations	Macro (3 directions)	Macro (3 directions)	Méso (direction 1) Macro (directions 2,3)

Cycles mésoscopiques :  $O(V^{2\delta})$ ,  $2\delta = 2(1 - \alpha_1) < 1$

Corrélations sur  $x_1$  :  $O(V^\delta)$ ,  $\delta = (1 - \alpha_1) < \alpha_1$

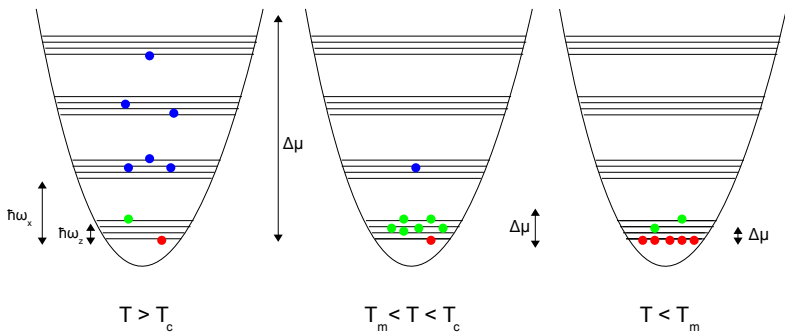
## Conséquences théoriques :

- 1) Les 3 critères sont équivalents pour (GP)
- 2) Méthode échelle : classification cycles et corrélations  $\Rightarrow$  nouvelle vision de la CBE généralisée
- 3) Classifications condensats reliées pour les 3 concepts

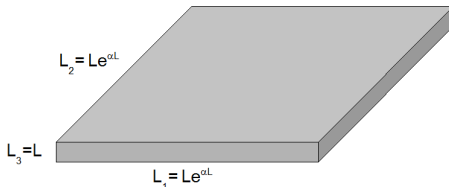
## Contact avec l'expérience :

- 1) Expérimentale : quasi-1D [Ketterle et al '01, Aspect et al '03] : nouvelle découverte  $T_\phi < T_c$
- 2) Ressemble la seconde transition pour gaz parfait [van den Berg '83]  $\Rightarrow$  réviser étude et approfondir les liens

### 3. Seconde transition [Thèse, Ch2 et Ch3]



## Modèle quasi-2D exponentiel :



Remarque :

Modèle différent de Casimir (anisotropie algébrique)

→ Anisotropie exponentielle

Paramètre  $\alpha > 0$ , mètre<sup>-1</sup>

## Ce qui est connu :

van den Berg-Lewis-Pulé, '83-86 : existence d'une seconde densité critique  $\rho_m > \rho_c$  pour apparition d'un *condensat macroscopique*

Après '86 : Rien

## But :

Effets géométrique sur le condensat  $\Rightarrow$  propriétés cinétique (sans interaction  $\neq$  régime Thomas-Fermi)

## Questions :

- 1) Prédictions théoriques sur la transition (deux régimes) : fractions CBE, seconde température critique  $T_m$ , longueur de cohérence
- 2) Modèles proches expérience : pièges harmoniques quasi-1D

## Modèle quasi-1D dans piège harmonique

Particules libres sous un champ extérieur harmonique :

$$V_{\text{ext}}(r) = \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2. \quad (12)$$

Hamiltonien :  $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{ext}}(r)$

Valeurs propres,  $s_\nu \in \mathbb{N}^*$ ,  $\nu = x, y, z$  :

$$\epsilon_{s_x s_y s_z} = \hbar\omega_x \left(s_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(s_y + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z \left(s_z + \frac{1}{2}\right). \quad (13)$$

Anisotropie exponentielle :

$$\omega_z = \omega_\perp e^{-\omega_c^2/\omega_\perp^2}, \quad \omega_\perp = \omega_x = \omega_y \quad (14)$$

Potentiel chimique effectif :  $\Delta\mu = \epsilon_{111} - \mu > 0$ ,

Pulsation  $\omega_0 = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ ,

**Nombre critique usuel** (en limite  $\omega_0 \rightarrow 0$ ) :

$$N \simeq \frac{1}{(\hbar\beta\omega_0)^3} \int_{\mathbb{R}^{3,+}} d^3\epsilon \frac{1}{e^{\beta(\epsilon+\Delta\mu)} - 1} < \frac{\zeta(3)}{(\hbar\beta\omega_0)^3} = N_c.$$

où  $\zeta(3) = \sum_{j \geq 1} \frac{1}{j^3}$

$\omega_z \ll \omega_{\perp} \Rightarrow$  condensat généralisé type III sur les modes  $s_z$



## Deux régimes de condensation :

1)  $\hbar\omega_z \ll \Delta\mu \ll \hbar\omega_\perp \Rightarrow$  Condensation généralisée sur modes  $s_z$  :

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

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

$$\text{Limite : } (N - N_c)\hbar\beta\omega_z < \omega_c^2/\omega_\perp^2$$

$$\text{Rappel : } \omega_z = \omega_\perp e^{-\omega_c^2/\omega_\perp^2}, \quad \omega_\perp = \omega_x = \omega_y$$

## Second nombre critique :

$$N_m = N_c + \frac{\omega_c^2}{\hbar\beta\omega_0^3}. \quad (15)$$

$$2) \Delta\mu = O\left((\hbar\omega_\perp)^3 e^{-\omega_c^2/\omega_\perp^2}\right) = O(\omega_0^3) \ll \hbar\omega_z$$

⇒ Saturation du quasi-condensat :

Coexistence avec condensat usuel :

$$N_{bec} = N - N_m$$

$$N_{Qbec} = N_m - N_c$$

**Première température critique (conventionnelle) :**

$$T_c = \frac{\hbar\omega_0}{k_B\zeta(3)^{1/3}} N^{1/3} . \quad (16)$$

**Seconde température critique :**

$T_m$  solution de  $N = N_m = N_c + \omega_c^2 / (\hbar\beta\omega_0^3)$  :

$$T_m^3 + \tau^2 T_m = T_c^3 , \quad (17)$$

*température effective d'anisotropie exponentielle :*

$$\tau = \frac{\hbar\omega_c}{k_B\zeta(3)^{1/2}} \quad (18)$$

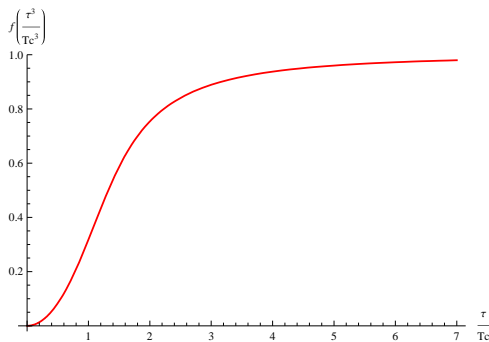
Ecart relatif entre les températures critiques :

$$\frac{T_c - T_m}{T_c} = f\left(\frac{\tau^3}{T_c^3}\right) \quad (19)$$

où :

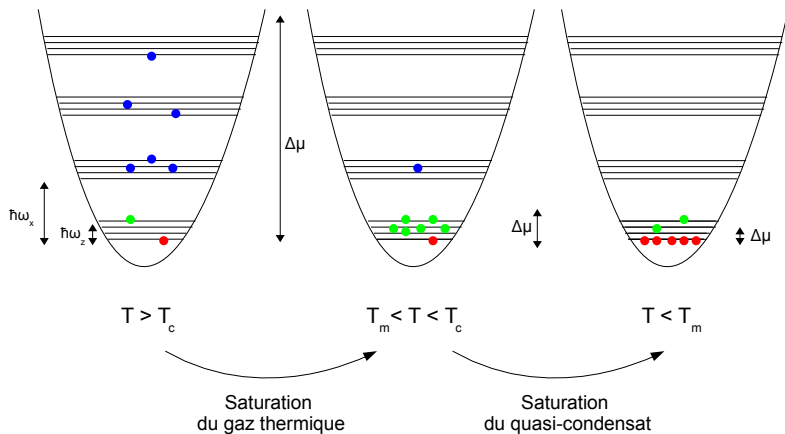
$$f(x) = 1 - \Omega(x)^{1/3} + \frac{x^{2/3}}{3} \Omega(x)^{-1/3} \quad (20)$$

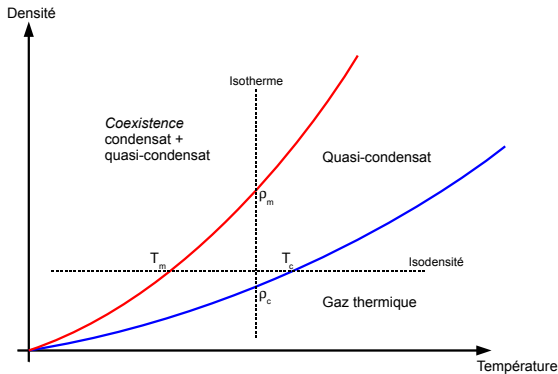
avec  $\Omega(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4}{27} x^2}\right)$ .



Courbe illustrant l'écart relatif entre les deux températures critique avec  $\frac{r}{T_c}$  en abscisse et l'écart relatif en ordonnées.

## Interprétation





## Diagramme de phases

## Fractions condensées :

Quasi-condensat :

$$\frac{N_{Qbec}}{N} = \begin{cases} 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3, & T_m \leq T \leq T_c, \\ \frac{\tau^2}{T_c^3} T, & T \leq T_m. \end{cases} \quad (21)$$

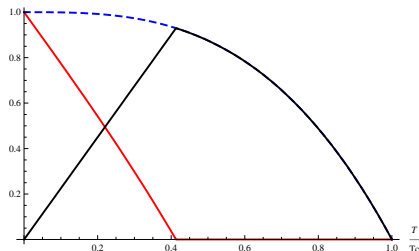
Condensat usuel :

$$\frac{N_{bec}}{N} = \begin{cases} 0, & T_m \leq T \leq T_c, \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \left(1 + \left(\frac{\tau}{T}\right)^2\right), & T \leq T_m, \end{cases} \quad (22)$$

Coexistence :

$$\frac{N_0}{N} = \frac{N_{Qbec}}{N} + \frac{N_{bec}}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3. \quad (23)$$





Courbe illustrant les fractions quasi-condensée en fonction de  $\frac{T}{T_c}$   
avec  $\frac{\tau}{T_c} = 1.5$ .

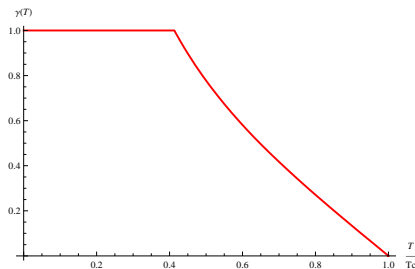
$$\frac{N_{bec}}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \left(1 + \left(\frac{\tau}{T}\right)^2\right), \quad T \leq T_m, \quad (24)$$

Longueur de cohérence :

$$\frac{L_c}{L_\perp} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\perp\beta\Delta\mu}} = \left(\frac{L_z}{L_\perp}\right)^{\gamma(T)}, \quad (25)$$

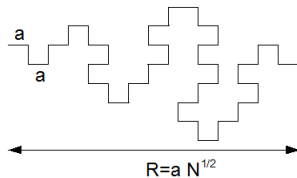
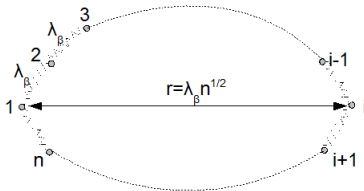
Avec l'exposant  $\gamma(T)$  :

$$\gamma(T) = \begin{cases} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \left(\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 - 1\right), & T_m < T < T_c. \\ 1, & T \leq T_m. \end{cases} \quad (26)$$

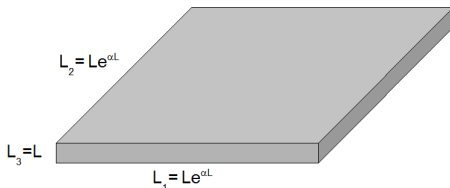


Courbe illustrant l'exposant  $\gamma(T)$  avec  $T/T_c$  en abscisse et  $T/T_c = 1.5$

## 4. Analogie cycles/polymères



## Modèle quasi-2D exponentiel :



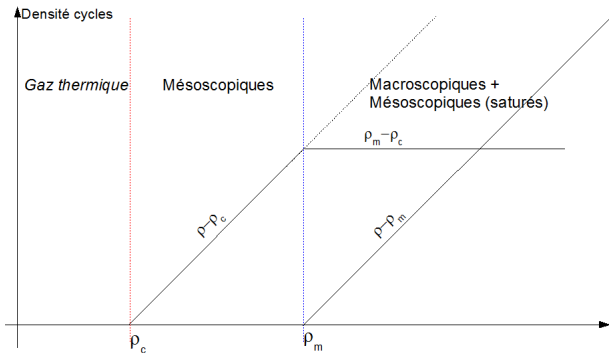
Question :

Seconde transition dans la représentation des cycles ?

Rappel :

- Cycles macroscopiques si  $\lambda(V) = O(V)$ .
- Cycles mésoscopiques si  $\lambda(V) = o(V)$ , e.g.  $\lambda(V) = V^\delta, \delta < 1$

## Seconde transition : taille de cycles longs

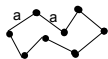


Changement d'échelle pour les tailles des cycles mésoscopiques :

$$r(L) = \lambda_\beta n(L)^{1/2} = \begin{cases} \lambda_\beta e^{\frac{\lambda_\beta^2}{2}(\rho - \rho_c(\beta))L}, & \rho < \rho_m(\beta) \\ \lambda_\beta e^{\alpha L}, & \rho > \rho_m(\beta) \end{cases}$$

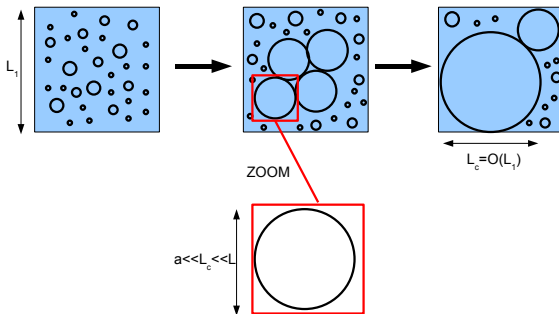
## Seconde transition pour les polymères

Polymère linéaire en boucle:

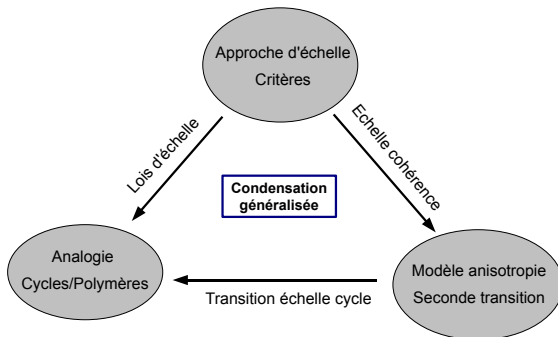


Symbolisation: ○

$$\text{Loi d'échelle: } R = a N^{1/2}$$



## Conclusion et perspectives





## Conclusion :

1) Equivalence des critères  $\Rightarrow$  CBE généralisée

Classification  $\Rightarrow$  nouveau visage à la CBE généralisée

2) Nouvelle interprétation de la seconde transition

Nouvelles propositions : fractions condensés, seconde température critique  $T_m$ , longueur de cohérence  $L_c$

Nouveaux modèles : quasi-1D harmonique exponentiellement anisotrope

3) Seconde transition via cycles

Relation d'échelle pour cycles/polymères

Analogies possibles gaz cycles /polymères

## Perspectives :

- 1) Interactions : décalage seconde température critique
- 2) Interactions : lien entre seconde transition et autres transitions  
 $T_{BKT}$ ,  $T_{\phi}$
- 3) Liens plus approfondis avec l'expérience
- 4) Interactions similaires aux modèles polymères : lois échelles  
Analogies avec transitions vitreuses

**Merci de votre attention**

Concepts de condensation de Bose-Einstein (CBE)

Equivalence des critères, classification et approche d'échelle

Seconde transition

Analogie cycles/polymères

**Conclusions et perspectives**

## Interactions :

$$\text{Paramètre : } \chi \equiv \frac{2aL_z}{L_\perp^2} = \frac{2a\sqrt{\lambda}}{L_\perp}$$

$$\lambda = \omega_\perp/\omega_z, L_\nu = \sqrt{\hbar/m\omega_\nu}, \nu = z, \perp$$

### Régimes :

- 1) Gaussien :  $\chi \ll 1$
- 2) Thomas-Fermi :  $\chi \sim 1$
- 3) Thonks-Girardeau :  $\chi \gg 1$

$$\text{Second paramètre : } \chi_c \equiv \frac{a}{a_c} = \frac{2a \ln(\lambda)^{1/4}}{L_{\perp}} < \chi$$

$$a_c = \sqrt{\hbar/m\omega_c}, \quad \omega_c = \omega_{\perp} \sqrt{\lambda}$$

Régimes :

- 1) Gaussien :  $\chi_c < \chi \ll 1$
- 2) Quasi-gaussien :  $\chi \sim 1, \chi_c \ll 1$
- 3) Intermédiaire :  $\chi \sim 1, \chi_c \sim 1$
- 4) Thonks-Girardeau :  $\chi \gg 1, \chi_c \gg 1$

## Fonction de corrélation locale :

$$g(r, r') = \sum_{s \in (\mathbb{N}^*)^3} \frac{\bar{\phi}_s(r) \phi_s(r')}{e^{\beta(\epsilon_s - \mu)} - 1}, \quad (27)$$

Avec :

$$\phi_s(r) = \phi_{s_x}(x) \phi_{s_y}(y) \phi_{s_z}(z),$$

où  $\phi_{s_\nu}(\nu)$ ,  $\nu = x, y, z$  sont des fonctions d'Hermite :

$$\phi_{s_\nu}(\nu) = \frac{1}{\sqrt{s_\nu! 2^{s_\nu} \sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{L_\nu}} H_{s_\nu}(\nu/L_\nu) e^{-\frac{\nu^2}{2L_\nu^2}}$$

$$\text{où } L_\nu = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\nu}}.$$

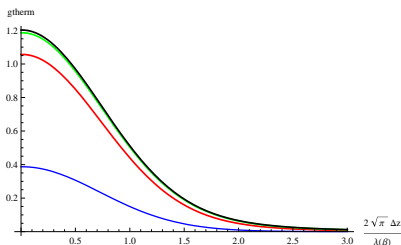
## Fonction de corrélation moyenne :

$$\begin{aligned}\langle g \rangle(\Delta r) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\tilde{r} g(\tilde{r} - \Delta r/2, \tilde{r} + \Delta r/2) \\ &= \langle g_{therm} \rangle(\Delta r) + \langle g_{qbec} \rangle(\Delta r) + \langle g_{bec} \rangle(\Delta r) \quad (28)\end{aligned}$$

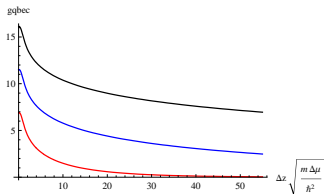
Avec  $\Delta r = (0, 0, \Delta z)$  :

$$\begin{aligned}\langle g_{therm} \rangle(\Delta r) &\simeq \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{j\beta\mu}}{j^3 \hbar^3 \omega_0^3} e^{-2m\Delta z^2 / j\beta\hbar^2}, \\ \langle g_{qbec} \rangle(\Delta r) &\simeq \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{-j\beta\Delta\mu}}{j\hbar\omega_z} e^{-2m\Delta z^2 \Delta\mu / j\hbar^2}, \\ \langle g_{bec} \rangle(\Delta r) &N_0 e^{-\frac{\Delta z^2}{L_z}},\end{aligned}$$





Allure des fonctions de corrélation n-CBE avec  $\hbar\omega_0 = 1$ ,  
 $\beta\hbar^2/2m = 1$  et  $\beta\Delta\mu = 1, 0.1, 0.01, 0.0000001$  respectivement pour  
 les courbes bleue, rouge, verte et noir, à l'échelle de longueur  
 $\Delta z = l \times \sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{2m}}$ ,  $l$  en abscisses.



Allure des fonctions de corrélations q-CBE  $\hbar\omega_z = 1$ ,  $\beta\hbar^2/2m = 1$   
 pour  $\beta\Delta\mu = 0.001$ ,  $0.0001$ ,  $0.000001$  respectivement pour les  
 courbes rouge, bleue et noir, à une échelle de longueur :

$$\Delta z = l \times \sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{2m} \beta\Delta\mu}.$$