

TD12 : Une transition liquide-gaz pour des bosons à 1D en interaction attractive

Alice Sinatra, Fabio Pietrucci, Sorbonne Université

June 21, 2024

1 Modèle

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

1.1 Solution par ansatz de Bethe dans l'espace libre

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

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

Ici $E_0(n)$ représente l'énergie interne du n -mère et $\frac{\hbar^2 k_i^2}{2nm}$ son énergie cinétique. On remarquera que l'énergie d'interaction, bien qu'elle soit prise en compte, n'apparaît pas dans le spectre.

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

1.2 Le dimère

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

1. Pour des atomes froids confinés à une dimension, on écrit constante g sous la forme

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

Montrer que le paramètre a , au dénominateur de (2), a les dimensions d'une longueur.

2. Écrire l'équation de Schrödinger $H\phi(x) = E\phi(x)$ pour la fonction d'onde $\phi(x)$ du mouvement relatif des deux atomes. On fera apparaître a dans le hamiltonien et on redéfinira l'énergie convenablement en posant $\alpha^2 = -mE/\hbar^2$.
3. Résoudre l'équation de Schrödinger pour $x > 0$ et $x < 0$, puis trouver, à une constante de normalisation près, l'expression de la solution $\phi(x)$ sur tout l'axe réel, sachant qu'elle doit être continue et de carré sommable.
4. Remarquer que $\phi'(x)$ est discontinue en $x = 0$.

5. Exprimer α en fonction de a .
6. Écrire la fonction d'onde $\phi(x)$, qui représente un état lié à deux corps, correctement normalisée.
7. Calculer l'extension l du dimère (mi-largeur à la hauteur relative $1/e$ de $\phi(x)$) et son énergie E en fonction de a . On doit trouver $l = 2a$.

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

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

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} g \delta(x_i - x_j) \quad (3)$$

on va considérer l'ansatz variationnel

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle \otimes \dots \otimes |\phi\rangle \quad (4)$$

et minimiser l'énergie moyenne E

$$E = N \int_{\mathbb{R}} dx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\phi}{dx} \right|^2 + \frac{g}{2} (N-1) |\phi|^4 \right\} \quad (5)$$

1. On va sortir un préfacteur de E par analyse dimensionnelle. En introduisant la fonction ψ et la longueur ξ telles que

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\xi}} \psi\left(\frac{x}{\xi}\right) \quad (6)$$

calculer ξ en fonction de N , g , \hbar et m , pour que l'énergie cinétique et l'énergie de champ moyen dans (5) aient le même coefficient.

2. Réexprimer la fonctionnelle énergie E sous la forme

$$E[\phi, \phi^*] = \frac{mg^2}{\hbar^2} N(N-1)^2 \epsilon[\psi, \psi^*] \quad (7)$$

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

3. En minimisant $\epsilon[\psi, \psi^*]$ avec une contrainte sur la normalisation de ψ , on trouve la fonction

$$\psi = \frac{\sqrt{2\nu}}{\text{ch}(\sqrt{2\nu}(\tilde{x} - \tilde{x}_0))}$$

où $\tilde{x} = x/\xi$ et $\nu > 0$ est un multiplicateur de Lagrange. Déterminer la valeur de ν pour avoir $\int |\psi|^2 = 1$.

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

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

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2\xi^{1/2}} \frac{1}{\text{ch}\left[\frac{x-x_0}{2\xi}\right]} \quad (8)$$

qui est un soliton brillant.

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

$$E_0^{\text{cm}} = -\frac{1}{24} \frac{mg^2}{\hbar^2} N^3 \quad (9)$$

- (c) Le potentiel chimique de champ moyen du N -mère : $\mu_0^{\text{cm}} \equiv dE_0^{\text{cm}}/dN$

$$\mu_0^{\text{cm}} = -\frac{1}{8} \frac{mg^2}{\hbar^2} N^2. \quad (10)$$

1.4 Dans une boîte avec des conditions aux limites périodiques

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

$$k_i = \frac{2\pi q}{L} \quad \text{avec} \quad q \in \mathbb{Z} \quad (11)$$

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

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

$$\frac{L}{l} \gg 1 \quad (12)$$

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

2. Calculer en fonction de $\rho = N/L$ l'énergie de Fermi E_F d'un gaz fictif de fermions à 1D sans interaction ayant la même densité de notre gaz de bosons.
3. Montrer que

$$\frac{L}{l} = \pi \left(\frac{|\mu_0|}{E_F} \right)^{1/2} \quad (13)$$

4. Expliquer pourquoi on s'attend à ce que la température critique de la transition liquide-gaz soit de l'ordre de (ou une fraction de) $|\mu_0|$.
5. En prenant $k_B T_c \simeq |\mu_0|$ montrer que la condition (12) implique que la transition liquide-gaz a lieu dans le régime non dégénéré

$$\rho \lambda \ll 1 \quad \text{avec} \quad \lambda = \sqrt{\frac{2\pi \hbar^2}{m k_B T}} \quad (14)$$

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

2 La transition liquide-gaz

Sous les conditions (12), (14) que nous avons identifiées, nous pouvons donc considérer chaque configuration (état propre) du système comme un ensemble $\{\mathcal{N}_n\}$ de \mathcal{N}_n n -mères indiscernables, à l'équilibre dans le régime non dégénéré, avec $\sum_{n=1}^N n \mathcal{N}_n = N$.

2.1 Calcul de la température critique

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

$$Z = \sum_{\text{conf}} Z_{\text{conf}} \quad (15)$$

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

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

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

$$e^{-\beta_c E_0(N)} \frac{L\sqrt{N}}{\lambda_c} = \frac{1}{N!} \left(\frac{L}{\lambda_c} \right)^N \quad (16)$$

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

$$\frac{1}{3}\beta_c |\mu_0| - \ln \left(\frac{e}{\rho \lambda_c} \right) = O \left(\frac{\ln N}{N} \right) \quad (17)$$

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

$$\frac{2}{3}\beta_c |\mu_0| + \ln \left(\frac{2}{3}\beta_c |\mu_0| \right) = \ln \left(\frac{\pi e^2 |\mu_0|}{6E_F} \right) \quad (18)$$

8. Montrer qu'on a alors

$$\frac{2}{3}\beta_c |\mu_0| = W \left(\frac{\pi e^2 |\mu_0|}{6E_F} \right) \quad (19)$$

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