

Une transition liquide-gaz pour des bosons en interaction attractive à une dimension

Christopher Herzog^a, Maxim Olshanii^b, Yvan Castin^c

^a*YITP, Stony Brook University, Stony Brook, NY 11784, USA*

^b*Department of Physics, University of Massachusetts at Boston, Boston, MA 02125, USA*

^c*Laboratoire Kastler Brossel, École normale supérieure, CNRS et UPMC, Paris, France*

Résumé

Nous considérons, en dimension un, une assemblée de N particules quantiques bosoniques interagissant par un potentiel de Dirac attractif, à l'équilibre thermique dans une boîte de quantification de longueur L avec des conditions aux limites périodiques. Pour de grandes valeurs de N , et lorsque L est bien supérieur au diamètre de l'état dimère dans l'espace réel, nous prédisons, par étude numérique et analytique d'un modèle simple mais déduit des premiers principes, que le système présente, à haute température c'est-à-dire dans le régime non dégénéré, une transition du premier ordre entre deux phases. La phase privilégiée à haute température est un gaz presque pur d'atomes, avec une faible fraction de dimères, et des fractions encore plus faibles de trimères, etc. La phase qui la supplante à moins haute température est un état lié mésoscopique ou macroscopique que nous qualifions de liquide, équivalent quantique du soliton brillant de la théorie de champ classique, et qui renferme toutes les particules du système, à l'exception d'une petite fraction gazeuse composée essentiellement d'atomes.

Mots-clés : gaz de bosons unidimensionnel ; soliton brillant ; liquide quantique ; atomes froids

1. Introduction et motivations

Depuis une vingtaine d'années, les expériences sur les atomes froids font preuve de leur extrême flexibilité dans le contrôle des paramètres et de la géométrie. En figeant par piégeage laser le mouvement des atomes dans leur état vibrationnel fondamental selon une ou deux directions de l'espace, on prépare des systèmes de dimensionnalité effective réduite, ce qui a conduit par exemple à l'observation dans un gaz atomique bidimensionnel de la transition de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [1]. De plus, par simple application d'un champ magnétique au voisinage d'une résonance de Feshbach, on peut ajuster la longueur de diffusion dans l'onde s , donc l'amplitude des interactions atomiques [2]. L'application adiabatique de ces deux outils (confinement transverse puis passage de la longueur de diffusion d'une valeur positive à une valeur négative) à un condensat de Bose-Einstein tridimensionnel presque pur, a permis les premières observations de N -mères dans un gaz atomique unidimensionnel en interaction attractive [3, 4], c'est-à-dire d'états liés à N corps dont l'existence est prédite par la théorie purement quantique pour tout $N > 1$ [5], et qui correspondent pour de grandes valeurs de N aux solitons brillants de l'équation de champ classique (Gross-Pitaevskii ou Schrödinger non linéaire).

Dans ce travail, nous identifions un autre mécanisme de formation de ces N -mères, purement à l'équilibre thermique¹ et dans un régime physique totalement différent. Nous montrons en effet qu'un gaz de bosons spatialement homogène, certes unidimensionnel et en interaction attractive, mais dans un régime non dégénéré, peut être thermodynamiquement moins favorable, c'est-à-dire d'énergie libre plus élevée, qu'une phase N -mérique presque pure. En d'autres termes, la phase gazeuse non dégénérée peut présenter une transition du premier ordre vers une phase presque entièrement liée, que nous qualifierons de « liquide » dans une limite thermodynamique à préciser.

1. On peut résoudre l'apparente contradiction entre l'hypothèse d'équilibre thermique et l'intégrabilité du système en thermalisant ce dernier par contact avec un gaz tampon d'une autre espèce chimique.

Il se trouve que la notion de transition de phase liquide-gaz dans un système d'atomes bosoniques froids est d'une criante actualité en dimension trois, dans la limite dite unitaire d'une interaction de portée négligeable et de longueur de diffusion infinie. Après la découverte numérique d'états liés fort probablement liquides [6], de $N = 3$ (les trimères d'Efimov [7]) jusqu'aux plus grandes valeurs de N accessibles (quelques dizaines), une telle transition a été très récemment mise en évidence par simulation de Monte-Carlo quantique sur une centaine de particules [8]. Cependant, la réalisation expérimentale en est rendue difficile par les fortes pertes à trois corps induites par l'effet Efimov [9, 10], et pourrait nécessiter une expérience dédiée.

Dans ce contexte, notre étude en dimension un semble présenter un double intérêt théorique et pratique. D'une part, l'intégrabilité de la théorie permet, sous des conditions que nous précisons en section 2, de construire de façon contrôlée un modèle, simple ensuite à étudier numériquement et à interpréter analytiquement, comme nous le ferons en section 3, y compris dans des limites thermodynamiques bien choisies, voir la section 4. D'autre part, l'insignifiance des pertes à trois corps, loin ici de la limite unitaire, permet d'envisager une réalisation expérimentale à court terme avec des atomes froids, ce sur quoi nous reviendrons dans la conclusion.

2. Construction du modèle

Nous considérons N particules bosoniques quantiques sans spin de masse m , vivant en dimension un sur l'axe Ox en l'absence de potentiel extérieur, et en interaction binaire par le potentiel de Dirac attractif $V(x_i - x_j) = g\delta(x_i - x_j)$, avec $g < 0$ donc. Une propriété fondamentale de ce modèle hamiltonien est son intégrabilité, puisqu'on peut en déterminer les fonctions d'onde propres par ansatz de Bethe [11], au prix de l'ajout par rapport au cas habituel répulsif [12] de quasi-vecteurs d'onde complexes [13, 14], ce que rend nécessaire l'existence d'états propres d'énergie négative, comme les auteurs de la référence [12] l'avaient déjà compris dans le cas général et explicitement mis en œuvre (dans un appendice) dans le cas $N = 2$.

Dans l'espace libre – La solution par ansatz de Bethe reste simple sur la droite réelle, c'est-à-dire dans un pur problème de diffusion des N bosons, car on connaît alors explicitement la valeur des quasi-vecteurs d'onde dans l'ansatz de Bethe [13]. Sous la condition que la fonction d'onde à N corps ne diverge pas à l'infini, on trouve que chaque état propre est composé d'une collection arbitraire de n -mères, indiscernables lorsqu'ils sont de même taille, le cas $n = 1$ correspondant simplement à une particule bosonique non liée, c'est-à-dire un atome. Chaque n -mère est caractérisé par une impulsion totale bien définie $\hbar K$, et diffuse élastiquement sur les autres n -mères, puisque toute réaction chimique d'association ou de dissociation, ou même simplement toute rétrodiffusion de deux n -mères de tailles différentes, est interdite par l'intégrabilité. Pour tout $n \geq 2$, il existe un et un seul état lié possible, d'énergie interne [5, 13]

$$E_0(n) = -\frac{mg^2}{24\hbar^2}n(n^2 - 1) \quad (1)$$

Dans un état de diffusion donné, il peut y avoir bien entendu plusieurs n -mères de même taille, le nombre total de fragments possible varie donc de un (toutes les particules sont liées dans le N -mère fondamental, comme dans un liquide) à N (toutes les particules sont sous forme atomique, gazeuse). En termes de la taille n_i de i -ème fragment et du vecteur d'onde K_i de son centre de masse, l'énergie de l'état de diffusion s'écrit simplement comme la somme des énergies internes et cinétiques :

$$E = \sum_i \left[E_0(n_i) + \frac{\hbar^2 K_i^2}{2n_i m} \right] \quad (2)$$

Dans la boîte – Nous étudions ici le système lorsqu'il est à l'équilibre thermique à une température T , ce qui nous oblige à l'enclôtre dans une boîte de quantification de longueur L , avec les habituelles conditions aux limites périodiques². Les quasi-vecteurs d'onde de l'ansatz de Bethe sont alors solutions d'un système d'équations non linéaires couplées [14], ce qui en interdit l'expression analytique, et rend la détermination du spectre d'énergie discret dans la boîte problématique, même numériquement, pour de grandes valeurs de N . Toute l'idée du présent travail est donc

². Même si l'on sait produire des boîtes de potentiel [15], il est utile de transposer notre étude au cas harmoniquement piégé, comme dans la référence pionnière [16].

de se restreindre à un cas limite traitable simplement, dans lequel la forme (2) obtenue dans l'espace libre reste approximativement valable dans la boîte, avec la seule condition de quantification naturelle :

$$K_i \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z} \quad (3)$$

Une boîte plus grande que les n -mères – Une première condition pour aller dans le sens du spectre (2) est que la structure et l'énergie interne des états liés soient peu affectées par la boîte. Comme l'état dimère est le moins fortement lié et de plus grand diamètre spatial, ceci requiert

$$\frac{L}{\ell} = \pi \left(\frac{|\mu_0|}{E_F} \right)^{1/2} \gg 1 \quad (4)$$

où apparaissent le diamètre du dimère $\ell \equiv 2\hbar^2/(m|g|)$, le potentiel chimique $\mu_0 \equiv -mg^2N^2/(8\hbar^2)$ du N -mère, et l'énergie de Fermi du gaz de fermions fictif unidimensionnel de même densité moyenne $\rho = N/L$ que celle des particules bosoniques, $E_F = \hbar^2(\pi\rho)^2/(2m)$. Comme la fonction d'onde des n -mères décroît exponentiellement avec la somme des distances entre les particules [5, 13], on s'attend à ce que l'erreur commise en négligeant l'effet de la boîte sur l'énergie interne $E_0(n)$ soit exponentiellement petite en L . Dans le cas $N = 2$, cette attente est confirmée par l'appendice A de la référence [12], dont les deux "états liés", correspondant à notre état dimère avec une impulsion totale $\hbar K = 0$ et $\hbar K = 2\pi\hbar/L$ respectivement, ont une énergie donnée par (2) aux déviations relatives près $\approx \pm 4 \exp(-L/\ell)$.

Dans le régime non dégénéré – La condition (4) oriente toute notre étude. En effet, comme $|\mu_0|$ est l'énergie de liaison d'une particule dans le N -mère, on peut raisonnablement s'attendre à ce qu'une éventuelle transition liquide-gaz se produise à une température de l'ordre d'une fraction de $|\mu_0|/k_B \gg E_F/k_B$, c'est-à-dire dans un régime où la phase atomique gazeuse est fortement non dégénérée :

$$\rho\lambda = \left(\frac{4E_F}{\pi k_B T} \right)^{1/2} \ll 1 \quad (5)$$

où $\lambda = [2\pi\hbar^2/(mk_B T)]^{1/2}$ est l'habituelle longueur d'onde thermique de de Broglie. Cette phase atomique se trouve dès lors proche également de la limite d'un spectre continu, au sens où toute somme discrète sur les K_i de l'équation (3) peut être remplacée par une intégrale, puisque $L \gg N\lambda$ implique $L \gg \lambda$. En un mot, elle est assimilable à un gaz classique. Nous nous plaçons désormais dans ce cas de haute température, ce qui simplifie grandement le calcul de la fonction de partition externe $Z_{n\text{-mères}}^{\text{ext}}$, c'est-à-dire d'origine cinétique, des n -mères associée au spectre (2). Pour une configuration interne donnée des N particules, le sous-ensemble des n -mères à n fixé forme un gaz, supposé pour l'instant parfait, de \mathcal{N}_n constituants indiscernables (bosoniques) de masse $nm \geq m$ donc de longueur de de Broglie $\lambda/n^{1/2} \leq \lambda$, et de densité $\leq \rho$, ce qui le rend au moins aussi proche de la limite classique que le gaz atomique (de $n = 1$) et conduit à [17]

$$Z_{n\text{-mères}}^{\text{ext}} \simeq \left(\frac{Ln^{1/2}}{\lambda} \right)^{\mathcal{N}_n} \frac{1}{\mathcal{N}_n!} \quad (6)$$

Des interactions entre n -mères négligeables – Une seconde condition pour l'utilisation du spectre d'énergie approximé par les Eqs. (2,3) est que les déplacements d'énergie dans la boîte dus aux *diffusions élastiques* donc aux interactions entre n -mères, soient négligeables devant l'énergie cinétique moyenne de chaque configuration interne³. Dans la phase purement atomique, l'estimation de l'énergie d'interaction est simplifiée par la remarque suivante : aux températures d'ordre $|\mu_0|/k_B$ considérées, l'énergie cinétique par atome $\approx k_B T/2$ est beaucoup plus grande que l'énergie de liaison du dimère $|E_0(2)|$ dès que $N \gg 1$, ou encore

$$\frac{\lambda}{\ell} = \frac{1}{N} \left(\frac{4\pi|\mu_0|}{k_B T} \right)^{1/2} \ll 1 \quad (7)$$

3. Ces diffusions élastiques sont bien prises en compte par la référence [13] dans l'espace libre, mais n'ont pas d'influence sur le spectre (2) puisque les différents n -mères y sont asymptotiquement libres.

si bien que le vecteur d'onde relatif typique de deux atomes $k_{\text{rel}} \approx 1/\lambda$ est bien plus *grand* que $m|g|/\hbar^2$, et que la diffusion à deux corps s'effectue dans le régime de Born, voir l'équation (99) dans la référence [13]⁴. L'énergie d'interaction par atome est alors simplement celle ρg de la théorie de champ moyen, compte tenu du facteur deux dû à l'effet de groupement bosonique, et peut être négligée si

$$\frac{\rho|g|}{k_B T} = \frac{4}{\pi} \frac{(E_F |\mu_0|)^{1/2}}{N k_B T} = \frac{1}{\pi} (\rho \lambda) \left(\frac{\lambda}{\ell} \right) \ll 1 \quad (8)$$

Cette condition semble être génériquement satisfaite, au même titre que (7), dans une limite de type thermodynamique, puisque N y est au dénominateur, ce que confirmera d'ailleurs la section 4. De plus, elle découle directement du produit des conditions (5,7), et peut donc être simplement omise à leur profit dans ce qui suit.

Pour estimer l'énergie d'interaction d'un atome avec un n -mère quasi-classique ($n \gg 1$), traitons le soliton brillant correspondant par la théorie de Bogolioubov, dans laquelle le processus de diffusion atome- n -mère au vecteur d'onde relatif k est décrit par les modes propres de quasi-particule $u_k(x)$ et $v_k(x)$. Si $u_k(x) \sim e^{ikx}$ pour $k > 0$ et $x \rightarrow -\infty$, l'expression exacte des fonctions modales [18, 19, 20] conduit à $u_k(x) \sim e^{i\theta(k)} e^{ikx}$ pour $x \rightarrow +\infty$, avec un déphasage $\theta(k) = -4 \arctan(k\ell/n)$. Les conditions aux limites périodiques imposent alors la condition de quantification $\exp(ikL) \exp[i\theta(k)] = 1$, d'où, pour notre grande boîte $L \gg \ell/n$, un espacement entre vecteurs d'onde successifs de $\delta k \simeq 2\pi/[L + \theta'(k)]$, où $\theta'(k)$ est la dérivée de $\theta(k)$, ce qui correspond à une longueur de quantification effective à l'énergie cinétique thermique

$$L_{\text{eff}} \approx L + \theta'(k = \sqrt{2\pi}/\lambda) \quad (9)$$

En reportant cette longueur effective dans la fonction de partition (6) écrite pour un atome, et en y réduisant $\theta'(k)$ à son expression asymptotique $\sim -4n/(k^2\ell)$ aux grands k compte tenu de $k_B T \approx |\mu_0|$, on trouve que le changement de longueur est très petit en valeur relative, et correspond à une énergie d'interaction de la paire atome- n -mère d'ordre $2n|g|/L$, c'est-à-dire d'ordre n fois l'énergie d'interaction d'une paire d'atomes⁵. On peut donc négliger l'interaction entre atomes et n -mères à la même condition que celle (8) obtenue pour les interactions entre atomes.

Le modèle – En conclusion, aux conditions de validité précédemment énoncées (4,5,7), notre système à haute température de N particules bosoniques en interaction attractive dans une boîte de quantification peut être supposé admettre comme configurations internes toutes les partitions possibles des N particules en atomes et états liés à deux corps, ..., à N corps, chaque sous-ensemble d'atomes ou d'états liés de même taille n étant assimilable à un gaz parfait classique de \mathcal{N}_n particules indiscernables de masse nm , et donc de fonction de partition (6). En termes mathématiques, la fonction de partition complète Z de notre modèle est la somme sur toutes les configurations internes à nombre total N de particules fixé, des fonctions de partition configurationnelles :

$$Z = \sum_{\text{conf}} Z_{\text{conf}}, \quad \text{où conf} \in \{(\mathcal{N}_n)_{1 \leq n \leq N} \in \mathbb{N}^N \text{ tels que } \sum_{n=1}^N n \mathcal{N}_n = N\}, \quad (10)$$

écrites, avec $\beta = 1/(k_B T)$, comme produits des fonctions de partition internes et externes,

$$Z_{\text{conf}} = \exp \left[-\beta \sum_{n=1}^N \mathcal{N}_n E_0(n) \right] \prod_{n=1}^N \left[\left(\frac{L n^{1/2}}{\lambda} \right)^{\mathcal{N}_n} \frac{1}{\mathcal{N}_n!} \right] \quad (11)$$

3. Explorations numériques mésoscopiques et interprétation en termes de transition liquide-gaz

Nous avons effectué une étude numérique directe du modèle (10,11) par simple énumération de toutes les configurations internes possibles $(\mathcal{N}_n)_{1 \leq n \leq N}$. Les résultats obtenus sont donc aussi exacts que le modèle. Cependant, le nombre de configurations à explorer est égal au nombre $p(N)$ de partitions de l'entier N , qui croît exponentiellement avec N [21], ce qui limite les simulations sur ordinateur de bureau à $N \lesssim 150$. Pour un nombre total de $N = 100$

4. Au contraire du cas tridimensionnel, la diffusion d'une onde plane progressive sur un potentiel attractif à courte portée en dimension un tend vers sa réflexion totale à basse énergie, ce qui est hors du régime de Born.

5. On pourra consulter aussi la note 14.

particules et à géométrie fixée $L/\ell = 100$, bien dans la limite de grande boîte (4), nous montrons sur la figure 1a et 1b la dépendance en température de deux observables, l'énergie libre totale $F = -k_B T \ln Z$ et le taux de fragmentation moyen $\langle \nu \rangle$, moyenne sur la distribution thermique avec les poids Z_{conf} du nombre relatif de fragments de chaque configuration,

$$\nu = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathcal{N}_n \in \left[\frac{1}{N}, 1 \right] \quad (12)$$

On constate sur la figure 1a un changement de pente assez brutal de l'énergie libre, autour de $T \simeq 105T_F \simeq 0, 1|\mu_0|/k_B$, bien dans le régime non dégénéré (5). Comme la dérivée $-\partial_T F$ donne l'entropie du système, ce changement de pente pourrait être le précurseur, dans notre système mésoscopique, d'une transition de phase du premier ordre, avec chaleur latente de changement d'état. Le passage assez brutal, autour de la même température, du taux moyen de fragmentation d'une valeur proche de un, à haute température, à une valeur proche de $1/N$, sur la figure 1b, suggère la transition d'une phase gazeuse surtout atomique, c'est-à-dire presque totalement dissociée, à une phase liquide composée essentiellement de N -mère fondamentale. Cette analyse est confirmée par la forme de la distribution du nombre de particules par classe de taille des n -mères $(n\langle \mathcal{N}_n \rangle / N)_{1 \leq n \leq N}$, qui présente à la transition deux maxima, l'un en $n = 1$ et l'autre en $n = N$, au sommet de pics étroits séparés par des nombres d'occupation infinitésimaux aux tailles intermédiaires, voir la figure 1c. Si l'on augmente (ou diminue) la température, on constate que le pic en $n = N$ (respectivement en $n = 1$) s'effondre rapidement, mais nous ne le montrons pas ici.

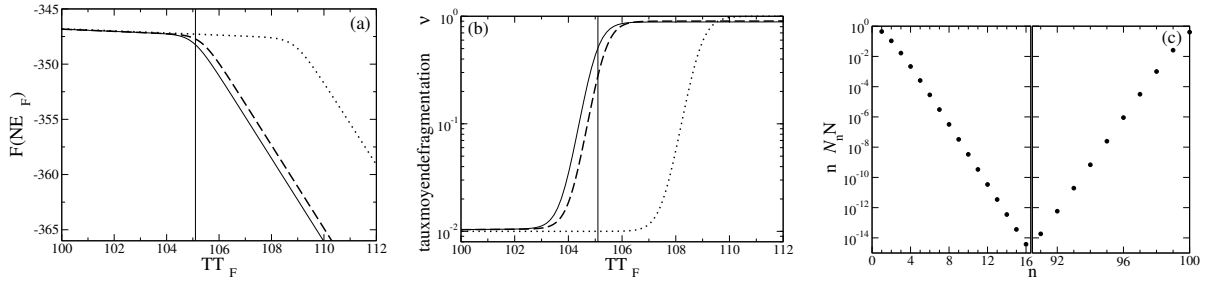


FIGURE 1: Pour $N = 100$ particules bosoniques de masse m à une dimension, en interaction attractive $-|g|\delta(x_i - x_j)$ dans une boîte de longueur $L = 100\ell$, où $\ell \equiv 2\hbar^2/(m|g|)$ est le diamètre du dimère, (a) énergie libre par particule F/N , en unités de l'énergie de Fermi $E_F = k_B T_F = \hbar^2(\pi\rho)^2/(2m)$, et (b) taux de fragmentation moyen $\langle \nu \rangle$, en fonction de la température en unités de la température de Fermi. En trait plein : le résultat numérique obtenu par énumération de toutes les configurations possibles. En pointillé : en se limitant aux deux configurations extrêmes, celle purement atomique et celle du N -mère. En tireté : en y ajoutant les mélanges gazeux en proportions arbitraires d'atomes et de dimères, ainsi que la phase liquide minimalement dissociée du $(N - 1)$ -mère en présence d'un atome. En (c), la fraction moyenne de particules bosoniques dans chaque classe de taille des n -mères, $n \mapsto n\langle \mathcal{N}_n \rangle / N$ (pour les n où elle est $> 10^{-15}$) obtenue par simulation numérique à la température $\approx 105, 1T_F$ telle que $\langle \nu \rangle$ croise $(1 + 1/N)/2$ [ligne verticale en (a) et (b)]. Noter l'échelle verticale logarithmique en (b) et (c).

Cherchons à donner un support plus quantitatif à notre scénario de transition liquide-gaz. En première approximation, retenons dans la fonction de partition Z seulement deux configurations internes, celle à N atomes, de contribution Z_{at} , et celle du N -mère pur, de contribution $Z_{N\text{-mère}}$. Les estimations correspondantes de l'énergie libre et du taux de fragmentation, $F^{(0)} = -k_B T \ln(Z_{\text{at}} + Z_{N\text{-mère}})$ et $\langle \nu \rangle^{(0)} = (N^{-1}Z_{N\text{-mère}} + Z_{\text{at}})/(Z_{\text{at}} + Z_{N\text{-mère}})$, sont représentées en pointillé sur la figure 1a et 1b. Le comportement général des résultats numériques est bien reproduit, à un décalage près vers les hautes températures d'environ 3,5%, comme nous l'avons vérifié explicitement. La température de transition $T_c^{(0)}$ prédite, obtenue en égalant les fonctions de partition Z_{at} et $Z_{N\text{-mère}}$, ce qui revient ici à choisir un taux de fragmentation moyen de $(1 + 1/N)/2$, est solution de

$$e^{-\beta_c^{(0)} E_0(N)} \frac{L\sqrt{N}}{\lambda_c^{(0)}} = \frac{1}{N!} \left(\frac{L}{\lambda_c^{(0)}} \right)^N \quad (13)$$

Pour les paramètres de la figure 1, ceci conduit à $T_c^{(0)} \simeq 108, 90T_F$, alors que le taux de fragmentation moyen dans la simulation numérique atteint la même valeur $(1 + 1/N)/2$ en $T \simeq 105, 1T_F$.

Notons qu'une forme approchée commode de l'équation (13) est obtenue en en prenant le logarithme et en divisant l'équation résultante par N . On passe ensuite à la limite des grands N , sans préciser encore comment la limite

thermodynamique doit être prise sur L (ce sera l'objet de la section 4), mais en faisant l'hypothèse peu contraignante que $L/\lambda_c^{(0)}$ croît moins vite qu'une certaine puissance de N , si bien que $\ln(L/\lambda_c^{(0)}) = O(\ln N)$. En utilisant l'équivalent de Stirling pour $N!$, on obtient

$$\frac{1}{3}\beta_c^{(0)}|\mu_0| - \ln\left(\frac{e}{\rho\lambda_c^{(0)}}\right) = O\left(\frac{\ln N}{N}\right) \quad (14)$$

En négligeant les termes de limite nulle aux grands N , et en choisissant comme inconnue la quantité sans dimension $\beta_c^{(0)}|\mu_0|$, on obtient l'équation implicite

$$\frac{2}{3}\beta_c^{(0)}|\mu_0| + \ln\left(\frac{2}{3}\beta_c^{(0)}|\mu_0|\right) = \ln\left(\frac{\pi e^2|\mu_0|}{6E_F}\right) \quad (15)$$

dont la solution est donnée par la fonction de Lambert W , fonction inverse de $x \mapsto xe^x$ pour $x \geq -1$, sous la forme⁶

$$\frac{2}{3}\beta_c^{(0)}|\mu_0| = W\left(\frac{\pi e^2|\mu_0|}{6E_F}\right) \quad (16)$$

D'après la condition de validité (4) du modèle, l'argument de W doit être beaucoup plus grand que un dans l'équation (16). Pour les paramètres de la figure 1, cette approximation aux grands N de $T_c^{(0)}$ reproduit sa valeur exacte à 3% près seulement par défaut, bien qu'il n'y ait somme toute que $N = 100$ particules.

Pour aller plus loin que ce modèle à deux phases pures, et chercher à comprendre pourquoi sa prédiction (en pointillé sur la figure 1) présente ce faible décalage en température avec le résultat de la simulation, remarquons une autre de ses insuffisances : aux températures au-delà de la zone de transition, il revient à supposer que le système est sous forme purement atomique et prédit un taux de fragmentation égal à un, alors que le résultat numérique présente un écart persistant d'environ 10% à la fragmentation totale. Ce qui est cohérent avec la présence d'une population non négligeable de dimères à la transition, voir la classe $n = 2$ sur la figure 1c, et donne l'idée, en seconde approximation, d'adjoindre à la phase purement atomique les mélanges en proportions arbitraires d'atomes et de dimères, pour aboutir à une phase *atomo-dimérique*⁷.

Par symétrie, bien que le besoin quantitatif s'en fasse moins sentir sur la figure 1a et 1b (le trait pointillé y dévie bien moins du trait continu à $T \leq 105T_F$ qu'à $T > 105T_F$), nous élargissons aussi la phase liquide concurrente, en ajoutant au N -mère la configuration *minimalement dissociée* à un $(N-1)$ -mère plus un atome, de fonction de partition $\approx e^{-\beta|\mu_0|} \frac{L}{\lambda} Z_{N\text{-mère}}$ pour $N \gg 1$. On voit apparaître le facteur exponentiel d'activation thermique attendu, qui traduit le fait que l'état N -mère est protégé de la dissociation par la bande d'énergie interdite de largeur $|\mu_0|$ le séparant (dans le référentiel du centre de masse) du continuum des états excités à N corps. Cependant, la phase minimalement dissociée bénéficie du facteur entropique cinétique $\propto L/\lambda$ fourni par le mouvement relatif du $(N-1)$ -mère et de l'atome libre. Dans le cas particulier de la figure 1, l'effet de bande interdite l'emporte largement sur l'effet entropique cinétique, $e^{-\beta|\mu_0|} \frac{L}{\lambda} \approx 0,06$ à la transition, mais ceci ne reste pas nécessairement vrai pour un grand système où L/λ peut diverger.

L'énergie libre et le taux de fragmentation moyen obtenus en gardant les deux phases élargies que nous venons de décrire, la phase atomo-dimérique et la phase avec un N -mère pur seulement à l'atome près, sont représentés en tireté sur la figure 1a et 1b. Le tireté est significativement plus proche des résultats numériques que le pointillé : la prise en compte des dimères, en abaissant l'énergie libre de la phase gazeuse, explique l'essentiel du décalage en température. La physique pour ce système de $N = 100$ particules semble donc quantitativement bien comprise.

Cependant, rien n'indique que l'élargissement de phase effectué ici suffise à la limite d'un grand système. En phase gazeuse, il reste à clarifier analytiquement le rôle des dimères, voire des trimères, quadrimères, etc ; en phase liquide, comme nous l'avons vu, l'inclusion de dissociations plus sévères du N -mère pourrait devenir nécessaire. On pourrait même imaginer qu'une phase de nature complètement différente émerge aux grands N . Tout ceci peut-il conduire à de grandes déviations de la température critique de l'estimation simple (13, 16), ou même à sa totale remise en question ? Ces questions, auxquelles nos simulations numériques mésoscopiques peuvent difficilement répondre, font l'objet de la section qui suit.

6. Au même ordre d'approximation, on prédit une chaleur latente de changement d'état par particule $Q^{(0)}/N = \frac{1}{3}|\mu_0| + \frac{1}{2}k_B T_c^{(0)}$, puisque l'on passe d'un N -mère d'entropie $k_B O(\ln N)$ à un gaz atomique classique d'entropie $Nk_B \ln[e^{3/2}/(\rho\lambda)] + k_B O(\ln N)$.

7. Sa fonction de partition vaut $Z_{\text{at-dim}} = Z_{\text{at}} S(z)$, où $z = \exp[-\beta E_0(2)] \lambda \sqrt{2}/L$ et la somme $S(z) = \sum_{s=0}^{\lfloor N/2 \rfloor} z^s N! / [s!(N-2s)!]$, portant sur le nombre s de dimères, est exprimable en termes d'une fonction hypergéométrique, $S(z) = {}_2F_0(-\frac{N}{2}, \frac{1}{2} - \frac{N}{2}; 4z)$.

4. Existence de la transition de phase et différentes limites à grand nombre de particules

Sur la foi des simulations numériques de la section précédente, limitées à une centaine de particules, notre système unidimensionnel de bosons en interaction attractive devrait admettre, dans une certaine limite macroscopique, une transition de phase du premier ordre entre une phase gazeuse et une phase liquide, dont la température critique a été estimée dans une approximation à deux phases pures, voir l'équation (13). L'objectif de cette section est d'abord d'apporter une justification analytique à l'existence d'une telle transition, avec une majoration de l'erreur commise sur T_c dans (13). Il est ensuite de construire différents types de limites thermodynamiques, de voir comment les effets de taille finie les affectent, et de déterminer dans quelle mesure les deux phases concurrentes sont, respectivement, surtout atomique et surtout liquide.

4.1. Existence de la transition et majoration de l'erreur sur T_c

D'utiles majorations de la fonction de partition Z_{conf} de l'équation (11) vont permettre d'établir simplement que les écarts à la monoatomicité de la phase gazeuse et à la pureté de la phase liquide ne remettent pas en question le scénario d'une transition de phase liquide-gaz, pourvu que cette transition se produise dans le régime non dégénéré, $\rho\lambda \ll 1$. Ceci exclut la possibilité qu'une troisième phase, passée inaperçue dans les simulations mésoscopiques, puisse émerger et l'emporter à la limite des grands N . Pour cela, nous définirons, dans l'espace des configurations, des voisinages des phases purement atomique et N -mérique, dont nous majorerons les corrections qu'ils apportent à l'énergie libre par particule, donc à T_c , par rapport à l'approximation à deux phases pures de la section précédente.

Au voisinage du gaz monoatomique – Prenons d'abord comme référence la phase purement atomique, de fonction de partition $Z_{\text{at}} = (L/\lambda)^N/N!$, en formant le rapport $Z_{\text{conf}}/Z_{\text{at}}$, et en éliminant le nombre d'atomes \mathcal{N}_1 grâce à la conservation du nombre total de particules N , $\mathcal{N}_1 = N - \sum_{n=2}^N n\mathcal{N}_n$. Cette élimination est simplifiée par le fait attendu que $E_0(1) = 0$ dans l'équation (1). Le seul facteur non trivial restant provient de la factorielle d'indiscernabilité atomique, que nous nous contentons donc de majorer,

$$\frac{N!}{\mathcal{N}_1!} = \left(\prod_{s=1+\mathcal{N}_1}^N s \right) \leq N^{N-\mathcal{N}_1} = N^{\sum_{n=2}^N n\mathcal{N}_n} \quad (17)$$

pour obtenir

$$\frac{Z_{\text{conf}}}{Z_{\text{at}}} \leq \prod_{n=2}^N \frac{[\alpha_n(N)]^{\mathcal{N}_n}}{\mathcal{N}_n!} \quad \text{avec} \quad \alpha_n(N) \equiv n^{1/2} e^{-\beta E_0(n)} N \left(\frac{N\lambda}{L} \right)^{n-1} \quad (18)$$

Intuitivement, cette inégalité est presque saturée, et les nombres entiers \mathcal{N}_n , pour $n \geq 2$, obéissent presque à des lois de Poisson de paramètres $\alpha_n(N)$, si le nombre d'atomes dans la phase considérée dévie très peu de N en valeur relative, en particulier $|1 - \langle \mathcal{N}_1 \rangle / N| \ll 1$, et si l'effet de troncature dû à la conservation du nombre total de particules est négligeable sur la distribution de \mathcal{N}_n , en particulier $\alpha_n(N) \ll N/n$.

Une interprétation physique simple de la quantité $\alpha_n(N)$ est que la fonction de partition d'un gaz de $N - n$ atomes en présence d'un unique n -mère, avec $2 \leq n \ll N$, vaut approximativement $\alpha_n(N)Z_{\text{at}}$: α_n est la première correction (en valeur relative) à la fonction de partition du gaz atomique due aux n -mères. Dans l'expression de $\alpha_n(N)$, le facteur $N^n \gg 1$ correspond à une augmentation de l'entropie de comptage, induite par le remplacement de n atomes par un n -mère discernable de ceux-ci. Le facteur $(\lambda/L)^{n-1} \ll 1$ correspond à une perte d'entropie cinétique due au remplacement des degrés de liberté externes de n atomes par ceux du mouvement d'un n -mère. À N fixé, plus la taille n du n -mère est grande, plus $\alpha_n(N)$ est petit et moins son introduction dans le système est favorable, puisque $\rho\lambda \ll 1$, ce qui suggère déjà que les trimères doivent avoir un effet plus faible sur l'énergie libre de la phase gazeuse que celui des dimères, et ainsi de suite.

Introduisons ensuite la notion de *voisinage d'ordre d'agrégation maximal* n_{max} de la phase atomique, qui contient toutes les configurations possibles composées de n -mères de tailles arbitraires n mais valant au plus n_{max} , avec n_{max} limité à $N/2$ afin d'éviter le recouvrement avec le voisinage du N -mère que nous allons définir dans la suite. Notre voisinage d'ordre maximal n_{max} contient la phase purement atomique comme cas particulier, donc sa fonction de partition $Z_{\text{vois. at.}}^{(n \leq n_{\text{max}})}$ est minorée par Z_{at} . Elle est majorée par application de (18) et extension de la sommation sur les $(\mathcal{N}_n)_{2 \leq n \leq n_{\text{max}}}$ à $\mathbb{N}^{n_{\text{max}}-1}$:

$$Z_{\text{at}} \leq Z_{\text{vois. at.}}^{(n \leq n_{\text{max}})} \equiv \sum_{\text{conf}/\mathcal{N}_n=0 \forall n > n_{\text{max}}} Z_{\text{conf}} \leq Z_{\text{at}} e^{\sum_{n=2}^{n_{\text{max}}} \alpha_n(N)}, \quad (19)$$

encadrement que nous utiliserons pour borner le changement de température critique dû à la présence de dimères, trimères, etc, dans la phase gazeuse.

Au voisinage du N -mère – Prenons maintenant comme référence le N -mère pur, de fonction de partition $Z_{N\text{-mère}} = \exp[-\beta E_0(N)]N^{1/2}L/\lambda$. Pour $k < N - k$, c'est-à-dire $k < N/2$, définissons comme son *sous-voisinage de degré de dissociation k* l'ensemble des configurations à un $(N - k)$ -mère en présence d'une distribution quelconque des k particules restantes en atomes, dimères, ... ou au plus un k -mère. Sa fonction de partition sera notée $Z_{\text{ss-vois. } N\text{-mère}}^{(k)}$. Le cas particulier $k = 0$ correspond au N -mère pur.

Appliquons alors le raisonnement de la majoration précédente, au prix de légères modifications : comme on a nécessairement $\mathcal{N}_{N-k} = 1$, et à part ce cas, $\mathcal{N}_n = 0$ dès que $n > k$, le nombre d'atomes est maintenant plus commodément éliminé par la relation

$$\mathcal{N}_1 = k - \sum_{n=2}^k n\mathcal{N}_n \quad \text{si bien que} \quad \frac{k!}{\mathcal{N}_1!} = \left(\prod_{s=1+\mathcal{N}_1}^k s \right) \leq k^{k-\mathcal{N}_1} = k^{\sum_{n=2}^k n\mathcal{N}_n} \quad (20)$$

On a aussi $(N - k)^{1/2} \leq N^{1/2}$. Tout ceci nous conduit à une majoration de $Z_{\text{ss-vois. } N\text{-mère}}^{(k)}$ dans le même esprit que (18), si ce n'est que les premières corrections α_n dues aux n -mères à la phase atomique entourant le $(N - k)$ -mère s'exercent maintenant sur k particules seulement, et non plus N , d'où le remplacement, dans l'équation (18), de $\alpha_n(N)$ par $\alpha_n(k)$, de Z_{at} par $(L/\lambda)^k/k!$ et de la borne supérieure N par k :

$$\frac{Z_{\text{conf}}}{Z_{N\text{-mère}}} \leq e^{-\beta[E_0(N-k) - E_0(N)]} \frac{(L/\lambda)^k}{k!} \prod_{n=2}^k \frac{[\alpha_n(k)]^{\mathcal{N}_n}}{\mathcal{N}_n!} \quad (21)$$

Notons que le premier facteur, exponentiel, est ici un frein à la dissociation, suivant la loi d'activation thermique attendue, correspondant à l'énergie minimale à fournir $E_0(N - k) - E_0(N) > 0$ pour extraire k particules du N -mère, énergie proche de $k|\mu_0|$ pour $k \ll N$, alors que les puissances de $L/\lambda \gg 1$ sont une incitation à la dissociation, par gain d'entropie cinétique. Par ailleurs, comme dans la discussion qui suit l'équation (18), l'inégalité (21) devrait être saturée lorsque le produit de la dissociation est presque purement atomique, les n -mères de $n \geq 2$ s'y distribuant alors selon des lois de Poisson de paramètres $\alpha_n(k)$. Maintenant, surmajorons, en l'étendant à \mathbb{N}^{k-1} , la somme sur toutes les configurations $(\mathcal{N}_n)_{2 \leq n \leq k}$ du sous-voisinage de degré k , puis définissons le *voisinage* du N -mère de degré de dissociation maximal k_{max} , par réunion de tous les sous-voisinages de degré $k \leq k_{\text{max}}$, de fonction de partition

$$Z_{\text{vois. } N\text{-mère}}^{(k \leq k_{\text{max}})} \equiv \sum_{k=0}^{k_{\text{max}}} Z_{\text{ss-vois. } N\text{-mère}}^{(k)} \quad (22)$$

Bien entendu, nous limitons cette définition à $k_{\text{max}} < N/2$. Nous obtenons finalement l'encadrement

$$Z_{N\text{-mère}} \leq Z_{\text{vois. } N\text{-mère}}^{(k \leq k_{\text{max}})} \equiv \sum_{\text{conf} / \exists n \geq N - k_{\text{max}} / \mathcal{N}_n \neq 0} Z_{\text{conf}} \leq Z_{N\text{-mère}} \sum_{k=0}^{k_{\text{max}}} e^{-\beta[E_0(N-k) - E_0(N)]} \frac{(L/\lambda)^k}{k!} e^{\sum_{n=2}^k \alpha_n(k)}, \quad (23)$$

que nous utiliserons pour borner le changement de température critique dû à la dissociation partielle du N -mère.

Implications sur la transition de phase – Testons le scénario à deux phases pures de la section 3, en élargissant la première à la phase gazeuse contenant des n -mères de tailles arbitraires jusqu'à n_{max} , et la seconde à la phase liquide contenant le N -mère partiellement dissocié en présence d'une phase arbitraire à au plus k_{max} particules. La température critique $T_c^{(e)}$, où l'exposant signifie « élargie », s'obtient alors en égalant la fonction de partition $Z_{\text{vois. at.}}^{(n \leq n_{\text{max}})}$ de la phase gazeuse élargie, voir l'équation (19), à celle $Z_{\text{vois. } N\text{-mère}}^{(k \leq k_{\text{max}})}$ de la phase liquide généralisée, voir l'équation (23). L'équation implicite (14) devient

$$\frac{1}{3}\beta_c^{(e)}|\mu_0| - \ln\left(\frac{e}{\rho\lambda_c^{(e)}}\right) + O\left(\frac{\ln N}{N}\right) = \frac{1}{N}\left(\ln\frac{Z_{\text{vois. at.}}^{(n \leq n_{\text{max}})}}{Z_{\text{at}}} - \ln\frac{Z_{\text{vois. } N\text{-mère}}^{(k \leq k_{\text{max}})}}{Z_{N\text{-mère}}}\right) \quad (24)$$

Pour valider le scénario à deux phases pures, il faut donc montrer que le second membre de cette équation est petit devant l'un des deux premiers termes du premier membre. À cette fin, rendons les majorations plus explicites dans les

sommes sur n des $\alpha_n(N)$ et des $\alpha_n(k)$, en utilisant le fait que $-\beta E_0(n)/(n-1) = n(n+1)\beta|\mu_0|/(3N^2)$, et que $n(n+1)$ y est majorable par $n_{\max}(n_{\max}+1)$ ou $k_{\max}(k_{\max}+1)$:

$$\sum_{n=2}^{n_{\max}} \alpha_n(N) \leq N \sum_{n=2}^{n_{\max}} n^{1/2} X^{n-1} \leq N \frac{\sqrt{2}X}{(1-X)^2} \quad \text{avec} \quad X = \frac{N\lambda}{L} e^{\beta|\mu_0|n_{\max}(n_{\max}+1)/(3N^2)} \quad (25)$$

$$\sum_{n=2}^k \alpha_n(k) \leq k \sum_{n=2}^{k_{\max}} n^{1/2} Y^{n-1} \leq k \frac{\sqrt{2}Y}{(1-Y)^2} \quad \text{avec} \quad Y = \frac{k_{\max}\lambda}{L} e^{\beta|\mu_0|k_{\max}(k_{\max}+1)/(3N^2)} \quad (26)$$

Pour n_{\max} et k_{\max} assez petits, nous devrions avoir $X < 1$ et $Y < 1$ ce qui a permis de surmajorer en étendant les sommations jusqu'à l'infini⁸. Le report de (25) dans l'encadrement (19) donne directement :

$$0 \leq \frac{1}{N} \ln \frac{Z_{\text{vois. at.}}^{(n \leq n_{\max})}}{Z_{\text{at}}} \leq \frac{\sqrt{2}X}{(1-X)^2} \quad (27)$$

Pour obtenir une forme utilisable de la majoration (23), minorons $[E_0(N-k) - E_0(N)]/(k|\mu_0|)$, qui est une fonction décroissante de k , par sa valeur $\eta = 1 - (k_{\max}/N) + (k_{\max}^2 - 1)/(3N^2)$ en $k = k_{\max}$, puis utilisons le surmajorant dans (26), et finalement surmajorons en étendant la somme sur k obtenue en une série sur \mathbb{N} :

$$0 \leq \frac{1}{N} \ln \frac{Z_{\text{vois. N-mère}}^{(k \leq k_{\max})}}{Z_{\text{N-mère}}} \leq \frac{e^{-\beta|\mu_0|\eta}}{\rho\lambda} e^{\sqrt{2}Y/(1-Y)^2} \quad (28)$$

Pour confirmer l'existence d'une transition de phase liquide-gaz à une température proche de celle $T_c^{(0)}$ de l'équation (13), dans le cas $N \gg 1$, nous élargissons au maximum les deux voisinages en prenant (pour N impair) $n_{\max} = k_{\max} = (N-1)/2$. Ces deux voisinages maximaux, disjoints, incluent dans leur ensemble *toutes* les configurations internes possibles⁹. Définissons T_c comme le point d'égalité des fonctions de partition de ces voisinages maximaux, et bornons l'écart supposé petit de T_c à $T_c^{(0)}$, en linéarisant le premier membre de l'équation (24), et en évaluant le second membre en $T = T_c^{(0)}$, ce qui permet d'éliminer $\beta|\mu_0|$ au profit de $\rho\lambda$ dans les quantités X et Y pour obtenir $X = 2Y = e^{1/4}(\rho\lambda_c^{(0)})^{3/4}$. Nous trouvons que la borne supérieure apparaissant dans (27) est plus grande que celle dans (28). Comme $\sqrt{2}e^{1/4} < 2$, nous concluons qu'il existe un voisinage de $\rho\lambda_c^{(0)} = 0$, c'est-à-dire de $L/\ell = +\infty$ d'après (14,16), sur lequel

$$\frac{|T_c - T_c^{(0)}|}{T_c^{(0)}} < \frac{2(\rho\lambda_c^{(0)})^{3/4}}{\ln[e/(\rho\lambda_c^{(0)})]} \xrightarrow{\rho\lambda_c^{(0)} \rightarrow 0} 0 \quad (29)$$

et qui peut donc bien accueillir une transition liquide-gaz, dans des limites thermodynamiques qu'il nous reste à préciser.

4.2. Une limite rendant le modèle exact

Comme le montre sa légende, la figure 1 dépend seulement de deux paramètres sans dimension, le nombre de particules N et la longueur de la boîte L/ℓ adimensionnée par le diamètre du dimère. Pour passer à la limite thermodynamique, le plus naturel est de faire tendre comme d'habitude N vers l'infini à force des interactions et densité moyenne fixées, ce qui correspond donc à

$$N \rightarrow +\infty \text{ à } \rho\ell = \text{constante} \quad (30)$$

et rend la première condition de validité (4) du modèle exactement satisfaite.

Déterminons d'abord la température critique $T_c^{(0)}$ dans l'approximation minimale à deux phases pures de la section 3. La limite (30), d'après (4), implique que $(|\mu_0|/E_F)^{1/2} = N/(\pi\rho\ell) \rightarrow +\infty$, point peut-être troublant pour le lecteur et

8. On a utilisé $\sum_{n=2}^{+\infty} (n/2)^{1/2} u^{n-1} \leq \sum_{n=2}^{+\infty} (n/2) u^{n-1} = u(1-u)/2(1-u)^2 \leq u/(1-u)^2, \forall u \in [0, 1[$.

9. En effet, soit la configuration ne comporte aucun n -mère de taille supérieure à $N/2$, auquel cas elle est dans le voisinage maximal du gaz monoatomique ; soit il existe un tel n -mère, qui est alors seul dans cette catégorie, et la configuration est dans le voisinage maximal du N -mère.

sur lequel nous reviendrons en section 4.3. Par itération de l'équation implicite (15), compte tenu du fait que $\beta_c^{(0)}|\mu_0|$ est bien plus grand que son logarithme, nous obtenons le comportement asymptotique

$$\frac{1}{3}\beta_c^{(0)}|\mu_0| \underset{N \rightarrow +\infty}{=} \ln N - \frac{1}{2} \ln \ln N + \ln \frac{e}{\rho \ell \sqrt{12\pi}} + O\left(\frac{\ln \ln N}{\ln N}\right) \quad (31)$$

Lorsque N diverge, la température critique $T_c^{(0)}$ devient donc, très lentement, arbitrairement plus faible que le potentiel chimique du N -mère. De plus, les deux dernières conditions de validité (5, 7) du modèle deviennent, à cette température, arbitrairement bien satisfaites :

$$\frac{\rho \lambda_c^{(0)}}{\rho \ell} = \frac{\lambda_c^{(0)}}{\ell} \underset{N \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(12\pi \ln N)^{1/2}}{N} \rightarrow 0 \quad (32)$$

En d'autres termes, le modèle simple (10,11) est asymptotiquement exact. Enfin, comme $\rho \lambda_c^{(0)} \rightarrow 0$ essentiellement comme une loi de puissance en N , l'équation (29) nous donne le résultat important que l'approximation à deux phases pures est, elle aussi, asymptotiquement exacte pour le calcul de T_c :

$$(k_B T_c - k_B T_c^{(0)})/|\mu_0| = O(1/N^{3/4}) \underset{N \rightarrow +\infty}{\rightarrow} 0 \quad (33)$$

Il ne faut pas en déduire que les dimères apportent une contribution négligeable à la fonction de partition de la phase gazeuse, ou que leur nombre moyen y tend vers zéro. Par étude de la fonction de partition atomo-dimérique, voir en section 3, ou plus simplement en réalisant que la phase gazeuse est ici dans le régime quasi-poissonien défini après l'équation (18), nous trouvons au contraire que $Z_{\text{at-dim}}/Z_{\text{at}}$ diverge comme $\exp[\alpha_2(N)]$, et que le nombre moyen de dimères diverge comme $\alpha_2(N)$, où $\alpha_2(N)$, défini par (18), diverge en $(\ln N)^{1/2}$ à la transition. Mais ceci est $o(N)$ donc trop lent pour contribuer asymptotiquement à l'énergie libre par particule, ou au taux moyen de fragmentation. Encore mieux, l'ajout de trimères apporte, d'après (18), une contribution à la fonction de partition négligeable par rapport à Z_{at} , car majorée par $\exp[\alpha_2(N)]\{\exp[\alpha_3(N)] - 1\} \rightarrow 0$, et le nombre moyen de trimères tend vers zéro comme $\alpha_3(N)$, à la transition. De même, la phase liquide y est asymptotiquement pure, car la probabilité d'y trouver un atome non lié, voir en section 3, tend vers zéro comme $\exp(-\beta_c|\mu_0|)L/\lambda_c$, donc en $\ln N/N$. Tout ceci permet de déterminer la loi d'échelle avec laquelle la limite thermodynamique est atteinte, par simple utilisation de l'approximation à deux phases pures. Par exemple, pour le taux de fragmentation moyen, on obtient la loi universelle¹⁰ :

$$\langle \nu \rangle \underset{N \rightarrow +\infty}{\rightarrow} \frac{\exp \delta}{1 + \exp \delta} \quad \text{à} \quad \delta \equiv \frac{T - T_c}{T_c} N \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{3} \beta_c^{(0)} |\mu_0| \right) \text{ fixé,} \quad (34)$$

c'est-à-dire que la largeur relative en température de la transition se rétrécit en $1/(N \ln N)$.

4.3. Une limite thermodynamique plus habituelle

La limite des grands N de la section 4.2 est inadaptée à une réalisation expérimentale, à force des interactions fixée, puisque $|\mu_0|$ y diverge en N^2 , ce qui rend la condition d'unidimensionalité du système ($|\mu_0|$ petit devant le quantum d'énergie vibrationnelle transverse $\hbar\omega_\perp$) asymptotiquement irréalisable à la transition¹¹. D'où l'idée de fixer Ng à une valeur constante dans l'expérience, en ajustant g grâce à une résonance de Feshbach. La limite (30) correspond alors à $N^2/L = \text{constante}$, ce qui est inhabituel. Considérons donc ici plutôt la limite

$$N \rightarrow +\infty \quad \text{à} \quad \frac{L}{\ell} = \text{constante} \quad (35)$$

10. Il suffit de poser $T = T_c^{(0)}/(1 - \epsilon)$, si bien que $Z_{\text{at}}/Z_{N\text{-mère}} = \exp[-\ln(1 - \epsilon)(N - 1)/2] \exp[-\epsilon\beta_c^{(0)}E_0(N)]$, avec $(N - 1)\ln(1 - \epsilon) \simeq -N\epsilon$ et $\beta_c^{(0)}E_0(N) \simeq -\beta_c^{(0)}|\mu_0|N/3$. Si l'on utilise (31) et un calcul numérique opto-dimérique (cf. le tiret sur la figure 1), on trouve pour $\rho\ell = 1$ que (34) est déjà presque atteinte à $N = 1000$.

11. Cette condition d'unidimensionalité justifie aussi l'utilisation d'une interaction en δ de Dirac, du moins dans le cas habituel pour les atomes froids où la véritable interaction tridimensionnelle V_{3D} est de portée négligeable par rapport à la distance moyenne entre particules [3]. En effet, V_{3D} induit, en présence du confinement harmonique transverse, une interaction effective à une dimension de portée effective non nulle $r_e \approx [\hbar/(m\omega_\perp)]^{1/2}$ [22] mais négligeable dans le régime de Born sous la condition suffisante $k_{\text{rel}}|r_e| \ll 1$, où le vecteur d'onde relatif typique est ici $k_{\text{rel}} = O(N/\ell)$.

qui conduit bien à une densité ρ constante si Ng est fixé, et à un rapport $|\mu_0|/E_F$ constant comme il se doit pour une honnête limite thermodynamique. Alors $\beta_c^{(0)}|\mu_0|$ admet une limite finie, donnée par (16), et $\rho\lambda_c^{(0)}/e = \exp(-\beta_c^{(0)}|\mu_0|/3)$. Mais $T_c^{(0)}$ ne coïncide plus avec T_c , elle en constitue seulement une bonne approximation dans un régime suffisamment non dégénéré, comme le garantit le résultat mathématique (29)¹². Il en va de même pour la relation universelle (34), qui prédit maintenant une largeur de la transition en $1/N$. Les deux premières conditions de validité (4,5) du modèle ne sont d'ailleurs plus qu'approximativement vérifiées, seule la troisième condition (7) est exactement remplie lorsque $N \rightarrow +\infty$ à la transition.

Même si le résultat mathématique (29) doit, pour être rigoureux, considérer les voisinages maximaux des deux phases pures, avec $n_{\max} \sim k_{\max} \sim N/2$, il est physiquement attendu que les premières corrections à $T_c^{(0)}$ proviennent en fait de voisinages plus immédiats $n_{\max} \ll N/2$ et $k_{\max} \ll N/2$. Comme le proche voisinage du gaz purement atomique est quasi-poissonien à la transition, tel qu'il est décrit après l'équation (18), nous trouvons que sa contribution dominante au second membre de (24) est celle $\alpha_2(N)/N \rightarrow \sqrt{2}\rho\lambda$ des dimères¹³, celle des trimères $\alpha_3(N)/N$ étant $O(\rho\lambda)^2$, etc. Nous voyons cependant apparaître une *insuffisance* de notre modèle : la phase purement atomique, bien que non dégénérée, reste en réalité un gaz bosonique, dont la fonction de partition $Z_{\text{at}}^{\text{Bose}}$ dévie déjà de celle du gaz classique $Z_{\text{at}} = (L/\lambda)^N/N!$ au premier ordre en $\rho\lambda$ [17], $N^{-1} \ln(Z_{\text{at}}^{\text{Bose}}/Z_{\text{at}}) = 2^{-3/2}\rho\lambda + O(\rho\lambda)^2$, ce qui apporte une correction à la température critique du même ordre en $\rho\lambda$ que celle des dimères, mais ignorée par le modèle.

Pour estimer la contribution du proche voisinage du N -mère, nous pouvons supposer, instruits par ce qui précède, qu'à l'ordre dominant en $\rho\lambda$, celui-ci se dissocie faiblement en un gaz purement atomique à k particules, bien dans le régime poissonien. Ce qui revient à dire que la seconde inégalité dans (23) est presque saturée, que les $\alpha_n(k)$ y sont négligeables, et que le N -mère se dissocie en un $(N-k)$ -mère plus k particules avec un poids essentiellement poissonien, compte tenu du fait que $k_{\max} \ll N/2$:

$$Z_{\text{ss-vois. } N\text{-mère}}^{(k)}/Z_{N\text{-mère}} \simeq \frac{\gamma^k}{k!} \quad \text{où} \quad \gamma = N \frac{e^{-\beta|\mu_0|}}{\rho\lambda} \quad (36)$$

À la transition, le taux de dissociation moyen de la phase liquide est alors $\gamma/N \simeq (\rho\lambda_c^{(0)})^2/e^3$, et la contribution qu'apporte cette dissociation au second membre de (24) est négligeable devant celle des dimères de la phase gazeuse. **Au-delà du modèle** – Afin de déterminer la vraie correction à $T_c^{(0)}$ au premier ordre en $\rho\lambda$, appliquons à la phase gazeuse¹⁴ une approche systématique à haute température, celle du développement du viriel quantique, $N^{-1} \ln(Z_{\text{gaz}}^{\text{Bose}}/Z_{\text{at}}) = b_2\rho\lambda + O(\rho\lambda)^2$, qui inclut à cet ordre la statistique quantique, les interactions entre atomes et la présence de dimères [23]. Avec la méthode de la §2.3 de la référence [24]¹⁵ nous trouvons pour des interactions attractives $b_2/\sqrt{2} = (e^u/2)[1 + \text{erf}(u^{1/2})] - 1/4$, où $u \equiv \beta|E_0(2)|$; dans la limite (35), $u \rightarrow 0$ donc $b_2 \rightarrow 2^{-3/2}$, ce qui se réduit à l'effet de la statistique quantique, au contraire des prédictions du modèle, et rend le décalage en température attribué aux dimères sur la figure 1 non significatif¹⁶ ! Notre interprétation en est que les états à deux atomes non liés sont nécessairement orthogonaux à l'état du dimère, fait non pris en compte dans le modèle ; si la constante de couplage g passait de 0^+ à 0^- , l'état dimère apparaîtrait mais un état non lié à deux atomes disparaîtrait, tout ceci à l'échelle d'énergie

12. Les formes plus précises (27,28) garantissent l'existence d'une solution T_c à l'équation $Z_{\text{vois. } N\text{-mère}}^{(k \leq N/2)}(T) = Z_{\text{vois. at.}}^{(n \leq N/2)}(T)$ dès que $L/\ell > 105, 1$.

13. Pour aller au-delà de l'approximation poissonienne, nous avons appliqué la méthode de Laplace à la somme $S(z)$ de la note 7, après utilisation de la formule de Stirling et remplacement de la somme sur s par une intégrale sur $x = 2s/N$. Alors $Z_{\text{at-dim}}/Z_{\text{at}} \sim \exp[Nu(x_0)]/(1+x_0)^{1/2}$ lorsque $N \rightarrow +\infty$, avec $u(x) = (x/2) \ln[2\sqrt{2}\rho\lambda/(ex)] - (1-x) \ln(1-x)$ et x_0 est la racine de $u'(x)$ sur $[0, 1]$. On a toujours $u(x_0) < \sqrt{2}\rho\lambda$, en accord avec la majoration (19) appliquée à $n_{\max} = 2$, et $u(x_0) \sim \alpha_2(N)/N$ si $\rho\lambda \rightarrow 0$.

14. En phase liquide, on peut appliquer la théorie de Bogolioubov au soliton brillant, si les quasi-particules de Bogolioubov, de spectre $\epsilon_k = |\mu_0| + \hbar^2 k^2/(2m)$, sont en nombre $\delta N = \sum_k [\exp(\beta\epsilon_k) - 1]^{-1} \ll N$, ce qui impose $k_B T \ll |\mu_0|$ si $\rho\lambda \ll 1$, et donc $\delta N/N \simeq e^{-\beta|\mu_0|}/(\rho\lambda) \ll 1$: dans la limite (35) à Ng fixé, la fonction de partition correspondante vérifie $N^{-1} \ln Z_{\text{Bog}} = \frac{1}{3}\beta|\mu_0| + (\rho\lambda)^{-1} \sum_{s \geq 1} \exp(-\beta|\mu_0|s)/\sqrt{s}$, le terme dominant $s = 1$ à $k_B T \ll |\mu_0|$ est donc bien prédit par (36) ; la contribution à $N^{-1} \ln Z_{\text{Bog}}$ du déphasage $\theta(k) = -4 \arctan(k\ell/N)$ dû au soliton [voir avant (9)] tend bien vers zéro aux grands N , comme $-(4\ell/L) \exp(-\beta|\mu_0|)[1 + O(k_B T/|\mu_0|)]/(N\rho\lambda)$.

15. Comme dans [25, 26] on utilise un régulateur harmonique de pulsation ω , si bien que $b_2/\sqrt{2} = 1/4 + \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{q \geq 0} (e^{-\beta\epsilon_q} - e^{-\beta\epsilon_q^{(0)}})$ où $(\epsilon_q)_{q \in \mathbb{N}}$ est le spectre de $H = p^2/m + m\omega^2 x^2/4 + g\delta(x)$ limité aux états pairs (bosoniques), solution de $\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\epsilon_q}{2\hbar\omega})/\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\epsilon_q}{2\hbar\omega}) = -2(2\hbar\omega/m)^{1/2} \hbar/g$ [27] et $\epsilon_q^{(0)} = (2q + 1/2)\hbar\omega$ est le spectre correspondant pour $g = 0$. Si $\omega \rightarrow 0$ à $g < 0$ fixé, $\epsilon_0 \rightarrow E_0(2)$ et $\epsilon_{q \geq 1} = \hbar\omega[2q - 1/2 + 2\Delta(\epsilon_q) + O(1/q)] \geq 0$, avec $\Delta(\epsilon) \equiv (1/\pi) \arctan\{-\epsilon/E_0(2)\}^{1/2}$. Si $g > 0$, $\epsilon_{q \geq 0} = \hbar\omega[2q + 3/2 - 2\Delta(\epsilon_q) + O(1/q)] \geq 0$ avec la même fonction $\Delta(\epsilon)$. Il reste à remplacer la somme sur q par une intégrale sur ϵ_q , pour obtenir b_2 donné dans le texte à $g < 0$, et $b_2/\sqrt{2} = \frac{e^u}{2}[1 - \text{erf}(u^{1/2})] - \frac{1}{4}$ (en accord avec [28]) à $g > 0$.

16. En revanche, la fraction de dimères dans la phase gazeuse prédite par le modèle est en accord avec celle $\sqrt{2}\rho\lambda \exp[-\beta E_0(2)]$ déduite de b_2 .

$|E_0(2)| \ll k_B T$, ce qui conduirait à une compensation dans b_2 : le second cumulatif b_2 varie bien continûment autour de $g = 0$. Dans notre modèle *corrigé*, nous obtenons finalement, pour la température critique de la transition liquide-gaz dans la limite (35), l'équation implicite :

$$\frac{1}{3} \beta_c |\mu_0| \stackrel{\text{modèle}}{\underset{\text{corrigé}}{=}} \ln \left(\frac{e}{\rho \lambda_c} \right) + 2^{-3/2} \rho \lambda_c + O(\rho \lambda_c)^2 \quad (37)$$

5. Conclusion

Nous avons limité ici notre étude du système unidimensionnel de bosons en interaction attractive $g < 0$ au cas particulier d'une grande boîte, de longueur L bien supérieure au diamètre ℓ de l'état dimère. Ceci signifie que, dans une distribution uniforme des N bosons à la densité $\rho = N/L$ dans la boîte, l'espacement moyen $1/\rho$ entre particules est bien plus grand que le N -mère fondamental, de diamètre $\xi \simeq \hbar^2/(Nm|g|)$ et de profil de densité en $[N/(4\xi)]/\text{ch}^2[x/(2\xi)]$ aux grands N . En un mot, nous sommes dans le régime $\rho \xi = \ell/(2L) \ll 1$.

Dans ces conditions particulières, et à l'équilibre thermique, nous avons montré qu'une transition de phase liquide-gaz se produit à la limite thermodynamique, à une température T_c donnée à divers ordres d'approximation par (16,37), mais tellement élevée que le système se trouve dans le régime non dégénéré $\rho \lambda_c \ll 1$, λ_c étant la longueur d'onde thermique de de Broglie correspondante. Sur une plage de température de largeur $O(1/N)T_c$, le système passe en effet d'une phase gazeuse uniforme de densité ρ , essentiellement monoatomique [la fraction de n -mères y est $O(\rho \lambda_c)^n$], à une phase liquide réunie en une goutte inhomogène de diamètre ξ , entourée d'une très faible fraction gazeuse $O(\rho \lambda_c)^2$ essentiellement monoatomique et uniforme.

D'un point de vue théorique, notre résultat semble contredire un argument général dû à Landau, suivant lequel il ne peut y avoir coexistence de deux phases différentes dans les systèmes unidimensionnels avec des interactions à courte portée, ces phases ayant tendance à se morceler indéfiniment jusqu'à former une émulsion [23]. Cependant, les n -mères ne constituent pas ici un liquide ordinaire extensif à densité plafonnée : leur énergie $E_0(n)$ n'est pas une fonction linéaire du nombre de particules n aux grands n , mais cubique, si bien que le morcellement du liquide en fragments mésoscopiques ou macroscopiques a un coût énergétique considérable (par exemple $(3/4)|E_0(N)|$ si l'on coupe le N -mère en deux parties égales), au lieu d'être simplement proportionnel au nombre de fragments avec un coefficient de proportionnalité intensif, comme il est supposé dans la §163 de la référence [23].

À ce stade, on pourrait nous faire l'objection de principe suivante : le défaut d'extensivité de notre phase liquide, qui résulte du modèle d'interaction en δ de Dirac, ne peut se maintenir à la limite $N \rightarrow +\infty$, dans laquelle la densité du liquide semble diverger et la portée non nulle de tout potentiel d'interaction réaliste, ne serait-ce que sous la forme d'un cœur dur, devrait donc se manifester. Cependant, à la limite thermodynamique, seul compte le paramètre sans dimension L/ℓ , voir l'équation (35), et non pas la longueur ℓ elle-même. À l'objection de principe, nous opposons donc une stratégie d'*ajustement* de la force des interactions en fonction du nombre de particules N , par résonance de Feshbach dans le cas des atomes froids, de façon que la densité $N/(4\xi)$ au centre de la phase liquide reste *constante*. Il faut pour cela que N^2/ℓ reste constant, donc que la constante de couplage g tende vers zéro comme $1/N^2$. D'après (35), on a alors que la longueur de la boîte L diverge en N^2 , et que le potentiel chimique μ_0 de la phase liquide fondamentale, l'énergie de Fermi E_F de la phase gazeuse et la température de transition T_c s'annulent tous en $1/N^2$. Mais, à la transition, le paramètre de dégénérescence quantique $\rho \lambda_c$ reste constant, ainsi que l'entropie par particule de la phase gazeuse, ce qui montre que ces basses températures en $1/N^2$ restent en principe accessibles par refroidissement adiabatique.

Par ailleurs, cette absence d'extensivité de la phase liquide pourrait avoir une conséquence importante sur la métastabilité de la phase gazeuse en dessous de la température de transition. De façon générale, on sait qu'un gaz macroscopique lentement refroidi présente en principe un retard considérable à la liquéfaction, à cause de la barrière d'énergie libre extensive entre les deux phases, mais qu'il l'évite en pratique par la nucléation locale de gouttelettes. Ici, ce mécanisme local pourrait être inhibé par la forte non linéarité en n de $E_0(n)$. Isolons en effet par la pensée une petite partie de la phase gazeuse à N' particules, avec $1, \rho \ell \ll N' \ll N$, ce que permettent son homogénéité et l'absence d'interaction à longue portée. Comme la température de liquéfaction T_c de l'équation (14) est, à des corrections logarithmiques près, proportionnelle à l'énergie de liaison d'une particule dans le liquide qui se forme, la petite partie ne devrait se liquéfier qu'à une température $T'_c \propto N'^2$ bien inférieure à celle $\propto N^2$ du gaz complet.

S'il se trouve que cette métastabilité constitue un sérieux obstacle expérimental, une échappatoire pourrait être de mesurer les énergies libres des deux phases de part et d'autre de la température critique, par chauffage graduel de la phase liquide déjà observée à basse température [3, 4] et par refroidissement progressif de la phase gazeuse facile à préparer à haute température, puis de constater qu'elles se croisent à T_c . L'énergie libre $F(T)$ peut en effet être déduite de l'énergie moyenne $E(T)$ par intégration de la relation $E = \partial_\beta(\beta F)$, où $\beta = 1/(k_B T)$. Or, l'énergie moyenne, comme le montre la référence [29], est une fonctionnelle connue de la distribution en impulsion $n(k)$ des particules, elle-même mesurable par temps de vol après coupure brutale des interactions grâce à une résonance de Feshbach.

Tout ceci laisse donc raisonnablement augurer d'une mise à l'épreuve expérimentale prochaine de notre scénario, et peut-être de l'observation d'une transition liquide-gaz dans un système d'atomes froids, ce qui constituerait une grande première.

Remerciements

L'équipe d'Y.C. est aussi affiliée à l'IFRAF. L'un d'entre nous (C.H.) a bénéficié d'une bourse Fulbright pour son séjour à Paris en 1997-1998, au cours duquel il a accompli ce travail dans ses grandes lignes, ainsi que des contrats numéros 1316617 et 0844827 de la « National Science Foundation » ; il remercie également la fondation Sloan. M.O. a reçu des financements de l'« Office of Naval Research »(N0004-121-0400) et de la « National Science Foundation »(PHY-1019197). Nous remercions Christoph Weiss pour son incitation à mener à terme ce projet.

Références

- [1] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, J. Dalibard, *Nature* **441**, 1118 (2006).
- [2] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).
- [3] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L.D. Carr, Y. Castin, C. Salomon, *Science* **296**, 1290 (2002).
- [4] K.E. Strecker, G.B. Partridge, A.G. Truscott, R.G. Hulet, *Nature* **417**, 150 (2002).
- [5] J.B. McGuire, *J. Math. Phys.* **5**, 622 (1964).
- [6] J. von Stecher, *J. Phys. B* **43**, 101002 (2010).
- [7] V. Efimov, *Sov. J. Nucl. Phys.* **12**, 589 (1971) ; V. Efimov, *Nucl. Phys. A* **210**, 157 (1973) ; A. Bulgac, V. Efimov, *Sov. J. Nucl. Phys.* **22**, 296 (1975).
- [8] S. Piatecki, W. Krauth, arXiv :1307.4671
- [9] B.S. Rem, A.T. Grier, I. Ferrier-Barbut, U. Eismann, T. Langen, N. Navon, L. Khaykovich, F. Werner, D.S. Petrov, F. Chevy, C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 163202 (2013).
- [10] P. Makotyn, C.E. Klauss, D.L. Goldberger, E.A. Cornell, D.S. Jin, arXiv :1308.3696, à paraître dans *Nature Physics* (2014).
- [11] M. Gaudin, *La fonction d'onde de Bethe* (Masson, Paris, 1983).
- [12] E.H. Lieb, W. Liniger, *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963).
- [13] Y. Castin, C. Herzog, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. 2, série IV, p. 419 (2001).
- [14] P. Calabrese, J.-S. Caux, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 150403 (2007) ; P. Calabrese, J.-S. Caux, *J. Stat. Mech.* P08032 (2007).
- [15] A.L. Gaunt, T.F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R.P. Smith, Z. Hadzibabic, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 200406 (2013).
- [16] V. Dunjko, C.P. Herzog, Y. Castin, M. Olshani, arXiv :cond-mat/0306514
- [17] B. Diu, C. Guthman, D. Lederer, B. Roulet, *Physique Statistique* (Hermann, Paris, 1989).
- [18] D.J. Kaup, *Phys. Rev. A* **42**, 5689 (1990).
- [19] S. Sinha, A. Yu. Cherny, D. Kovrizhin, J. Brand, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 030406 (2006).
- [20] Y. Castin, *Eur. Phys. J. B* **68**, 317 (2009).
- [21] G.H. Hardy, S. Ramanujan, *C. R. Acad. Sci. Paris*, **164** (1), 35 (1917) ; G.H. Hardy, S. Ramanujan, *Proc. Lond. Math. Soc.* **17**, 75 (1918).
- [22] V. Dunjko, V. Lorent, M. Olshani, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5413 (2001).
- [23] L. Landau, E. Lifchitz, *Physique statistique* (éditions Mir, Moscou, 1984)
- [24] Y. Castin, F. Werner, *Rev. Can. Phys.* **91**, 382 (2013).
- [25] A. Comtet, Y. Georgelin, S. Ouvry, *J. Phys. A* **22**, 3917 (1989) ; J. McCabe, S. Ouvry, *Phys. Lett. B* **260**, 113 (1990).
- [26] Xia-Ji Liu, Hui Hu, P. D. Drummond, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 160401 (2009) ; *Phys. Rev. A* **82**, 023619 (2010).
- [27] T. Busch, B.G. Englert, K. Rzazewski, M. Wilkens, *Found. Phys.* **28**, 549 (1998).
- [28] S. Servadio, *J. Math. Phys.* **12**, 2413 (1971) ; L.R. Dodd, A.M. Gibbs, *J. Math. Phys.* **15**, 41 (1974).
- [29] M. Olshani, V. Dunjko, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 090401 (2003).